

Affidavit

Je soussigné, Laurie Cappellugola, déclare par la présente que le travail présenté dans ce manuscrit est mon propre travail, réalisé sous la direction scientifique de Christian Morel, dans le respect des principes d'honnêteté, d'intégrité et de responsabilité inhérents à la mission de recherche. Les travaux de recherche et la rédaction de ce manuscrit ont été réalisés dans le respect à la fois de la charte nationale de déontologie des métiers de la recherche et de la charte d'Aix-Marseille Université relative à la lutte contre le plagiat.

Ce travail n'a pas été précédemment soumis en France ou à l'étranger dans une version identique ou similaire à un organisme examinateur.

Fait à Marseille le 27/04/2023



Cette œuvre est mise à disposition selon les termes de la [Licence Creative Commons Attribution - Pas d'Utilisation Commerciale - Pas de Modification 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

Liste de publications et participation aux conférences

Liste des publications et/ou brevets réalisées dans le cadre du projet de thèse :

1. L. CAPPELLUGOLA , S. CURTONI , M. DUPONT *et al.* « Modelisation of Light Transmission through Surfaces with Thin Film Optical Coating in Geant4 ». : *2021 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference (NSS/MIC)*. DOI : 10.1109/NSS/MIC44867.2021.9875513.
URL : <https://ieeexplore.ieee.org/document/9875513/>
2. Chi-Hsun S UNG , Laurie C APPELLUGOLA , Megane F OLLIN *et al.* « Detailed simulation for the ClearMind prototype detection module and event re- construction using artificial intelligence ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* arXiv :2209.11587 (23 sept. 2022). arXiv : 2209.11587[physics] .
URL : <http://arxiv.org/abs/2209.11587> (visité le 04/10/2022)

Participation aux conférences et écoles d'été au cours de la période de thèse :

1. L. Cappellugola, "Modelisation of light transmission through surfaces with optical coating in Geant4", Assemblée Générale GDR Mi2B, oral, 27 sept. 2021, Ecully
2. L. Cappellugola, "Modelisation of light transmission through surfaces with optical coating in Geant4", IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference (NSS/MIC), oral, 16-23 Oct 2021, Yokohama (virtual)
3. L. Cappellugola, "Monte Carlo modeling of a "scintronic" detection module coupled to a microchannel plate multiplier tube (MCP-PMT)", Assemblée Générale GDR Mi2B, oral, 14 juin 2022, Orsay
4. L. Cappellugola, M. Dupont, S. Curtoni, C.-H. Sung, V. Sharyy, D. Yvon, T. Proslie, C. Morel "Update of the optical light transport in Geant4 to model optical coating", Technical Forum Geant4, 27th Geant4 Collaboration Meeting, oral, 27 Sep 2022, Rennes (virtual)
5. Ecole thématique "De la Physique au Détecteur" - IN2P3, 22-26 nov. 2021, Fréjus

Résumé

La tomographie par émission de positrons (TEP) est une modalité d'imagerie de la médecine nucléaire, qui permet d'obtenir une image fonctionnelle grâce à la détection en coïncidence de paires de photons d'annihilation issus de la désintégration d'un radiotraceur fixé sur la zone d'intérêt.

L'amélioration de la résolution temporelle de la coïncidence (CTR) est cruciale pour optimiser la qualité de l'image reconstruite en TEP à temps-de-vol. C'est l'objectif que s'est fixé le projet ClearMind financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR), qui est porté par l'Institut de Recherche sur les Lois Fondamentales de l'Univers (Irfu) du Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA) à Saclay et auquel participe le Centre de Physique de Particules de Marseille (CPPM) et Laboratoire Irène Joliot-Curie (IJCLab) à Orsay, deux laboratoires de l'Institut National de Physique Nucléaire et de Physique de Particules (IN2P3). Ce projet, dans lequel s'inscrit ma thèse de doctorat, vise à améliorer la résolution temporelle de la détection du rayon gamma grâce à un détecteur composé d'un cristal de PWO, sur lequel est directement déposée une photocathode d'indice de réfraction supérieur à celui du cristal, ce qui permet de maximiser la transmittance vers la photocathode de la lumière générée dans le cristal. Ce cristal dit *scintronique* sert de fenêtre d'entrée à un tube multiplicateur à galette à micro-canaux (MCP-PMT), dont le temps de transit des électrons très court offre une excellente résolution temporelle. La détection de photons de lumière Tcherenkov, émis de manière pratiquement instantanée lors de l'interaction des rayons gamma dans le cristal, et les constantes de temps de décroissance de l'émission rapides de scintillation du PWO permettent de s'attendre à une bonne résolution temporelle du module de détection développé dans le cadre du projet ClearMind.

L'évaporation de la photocathode directement sur une face du cristal nécessite de déposer au préalable une couche de passivation sur le cristal afin de protéger la photocathode. Cette couche de passivation a les caractéristiques d'une couche mince, ce qui induit des phénomènes d'interférences et de transmission frustrée, dont la modélisation est indispensable à la simulation Monte Carlo du module de détection.

Ce travail présente l'implémentation d'une nouvelle méthode dans le logiciel de simulation Monte Carlo Geant4, appelée *CoatedDielectricDielectric*, qui permet de modéliser le transport optique des photons à travers une interface composée d'une couche mince. L'étude de la transmittance à travers cette interface nous permet d'évaluer l'impact de la transmission frustrée sur les performances du module de détection, dont nous avons montré qu'elle contribue pour moitié à la CTR. Nous avons vérifié par simulation Monte Carlo que l'utilisation d'une couche mince avec un indice de réfraction supérieur à celui du cristal permet d'optimiser la transmittance des photons vers la photocathode, et donc la résolution temporelle de notre détecteur.

Ainsi, nous avons obtenu une CTR de 405 ± 6 ps FWHM pour une couche mince de 100 nm d'oxyde d'aluminium, dont l'indice de réfraction est inférieur à celui du PWO, contre une CTR de 290 ± 3 ps FWHM pour une couche mince de 100 nm d'oxyde de titane, dont l'indice de réfraction est supérieur à celui du PWO. De la même manière, une étude sur l'épaisseur de la couche de passivation montre qu'une couche de 20 nm d'oxyde d'aluminium permet d'améliorer la CTR de 26 % par rapport à une couche de 100 nm.

La caractérisation de cellules tests illuminées par un faisceau de lumière délivré par un monochromateur et la comparaison avec les résultats de la simulation Monte Carlo nous ont permis de valider l'implémentation du module optique dans Geant4 et d'en déduire les caractéristiques de notre cristal *scintronique*, comme l'indice de réfraction et la longueur d'absorption des différents composants, ainsi que l'épaisseur des couches minces.

Une discussion critique des résultats obtenus nous mène à suggérer quelques axes de développement possibles pour améliorer les performances du module de détection et tendre vers une CTR inférieure à 100 ps FWHM.

Mots clés : TEP, tungstate de plomb, couche mince, résolution temporelle, CTR, résolution spatiale, Geant4, simulation Monte Carlo

Abstract

Positron emission tomography (PET) is an imaging modality in nuclear medicine, which allows to obtain a functional image thanks to the detection in coincidence of pairs of annihilation photons resulting from the decay of a radiotracer fixed on the area of interest.

The improvement of the the coincidence time resolution (CTR) is crucial to optimize the quality of the reconstructed image in time-of-flight (TOF)-PET. This is the objective of the ClearMind project funded by the French National Research Agency (ANR), which is led by the Institut de Recherche sur les Lois Fondamentales de l'Univers (Irfu) of the Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA) in Saclay and in which the Centre de Physique des Particules de Marseille (CPPM) and Laboratoire Irène Joliot-Curie (IJCLab) in Orsay, two laboratories of the Institut National de Physique Nucléaire et de Physique de Particules (IN2P3), are participating. This project, in which my PhD thesis is included, aims at improving the temporal resolution of gamma ray detection thanks to a detector composed of a PWO crystal, on which is directly deposited a photocathode with a refractive index higher than that of the crystal, which allows to maximize the transmittance towards the photocathode of the light generated in the crystal. This so-called *scintronic* crystal is used as an input window for a micro-channel plate multiplier tube (MCP-PMT), whose very short electron transit time provides excellent time resolution. The detection of Cherenkov light photons, emitted almost instantaneously upon interaction of gamma rays in the crystal, and the fast scintillation time constants of the MCP-PMT allow to expect a good temporal resolution of the detection module developed in the ClearMind project.

The evaporation of the photocathode directly on a face of the crystal requires to deposit beforehand a passivation layer on the crystal in order to protect the photocathode. This passivation layer has the characteristics of a thin film, which induces interference and frustrated transmission phenomena, whose modeling is essential to the Monte Carlo simulation of the detection module.

This work presents the implementation of a new method in the Monte Carlo simulation software Geant4, called `CoatedDielectricDielectric`, which allows to model the optical transport of photons through an interface composed of a thin layer. The study of the transmittance through this interface allows us to evaluate the impact of the frustrated transmission on the performance of the detection module, which we have shown to contribute half of the CTR. We have verified by Monte Carlo simulation that the use of a thin layer with a refractive index higher than that of the crystal allows to optimize the transmittance of the photons towards the photocathode, and thus the temporal resolution of our detector. Thus, we obtained a CTR of 405 ± 6 ps FWHM for a 100 nm aluminum oxide thin film, whose refractive index is lower than that of PWO,

against a CTR of 290 ± 3 ps FWHM for a 100 nm titanium oxide thin film, whose refractive index is higher than that of PWO. Similarly, a passivation layer thickness study shows that a 20 nm layer of aluminum oxide improves the CTR by 26 % compared to a 100 nm layer.

The characterization of test cells illuminated by a beam of light delivered by a monochromator and the comparison with the results of the Monte Carlo simulation allowed us to validate the implementation of the optical module in Geant4 and to deduce the characteristics of our crystal, such as the refractive index and the absorption length of the various components, as well as the thickness of the thin layers.

A critical discussion of the obtained results leads us to suggest some possible development axes to improve the performances of the detection module and to tend towards a CTR lower than 100 ps FWHM.

Keywords: TEP, tungstate de plomb, thin layer, temporal resolution, CTR, spatial resolution, Geant4, Monte Carlo simulation

Remerciements

Je tiens avant tout à remercier les membres de mon jury : Etienne Auffray, Marc Verderi et Carlotta Trigilia pour leur patience, leurs conseils enrichissants et leur temps.

Merci également à Cristinel Diaconu d'avoir pris le temps de présider ma défense de thèse, mais également de m'avoir accueilli au sein du laboratoire et d'avoir entretenu une ambiance chaleureuse et conviviale tout du long.

Merci à Christian Morel de m'avoir encouragé à effectuer cette thèse et de m'avoir motivé tout au long de mon parcours, malgré les difficultés que j'ai pu rencontrer. Merci d'avoir été le directeur de thèse dont j'avais besoin. Je te promets de ne pas relâcher mes efforts pour travailler mon débit de parole!

Merci également à Mathieu Dupont pour l'aide que tu m'as apporté et pour m'avoir permis d'optimiser mes codes autant que mes compétences.

Merci à Yannick Boursier pour ces échanges constructifs que nous avons pu avoir, et ce depuis Polytech.

Merci à Alicia et Afef, vous avez été des collègues de boulots formidables, toujours souriantes, toujours présentes et toujours prêtes à aider.

Merci à toute l'équipe du CEA avec laquelle j'ai eu grand plaisir à travailler. Merci Dominique, Slava, et Mégane pour tous vos conseils et votre suivi. Merci tout particulièrement à Chi-Hsun qui a toujours su m'aider et répondre à la moindre de mes questions à toutes heures de la journée. Je ne serais jamais allée aussi loin sans ton aide

Merci également à Sebastien Curtoni qui m'a appris que la recherche se n'est pas seulement de trouver les bonnes réponses mais avant tout de se poser les bonnes questions. Merci pour toutes les connaissances que tu m'as permis de développer.

Merci à toutes les personnes du labo avec lesquelles j'ai eu la chance d'interagir : Fabrice pour ta bonne humeur contagieuse, Adrien pour ton efficacité et ton aide à chaque fois que j'en ai eu besoin, Laurence, Guy et Marie pour votre motivation sans faille lorsqu'il fallait me motiver à courir. Evieusement, merci à Jérôme et Julien qui ont toujours cru en moi et ne m'ont jamais laissé tomber.

Merci à tous les doctorants et docteurs : Maxime, Jean, Marie, Arthur, Luc, Tyann (alias Etienne), Godefroy, Hichem. Merci d'être des fous qui m'ont permis de décompresser les soirs où j'en avais besoin et merci d'avoir toujours été présents même quand je ne sortais plus de mon bureau. Vous êtes des amis comme il y en a peu et je ne doute pas que vous le resterez encore longtemps. Merci au meilleur co-bureau du monde, Damien, pour nos fous rires entre deux séances de boulot. Et merci à Camille pour ta bonne humeur au quotidien et ton soutien constant depuis notre rencontre! Je suis sûre que tu aurais été un co-bureau formidable!

Merci à tous mes amis qui ont toujours été là, qui ont supporté mes sauts d'humeur et qui m'ont malgré tout toujours soutenue et comprise. C'est grâce à vous que je n'ai jamais baissé les bras.

Merci à Guillaume qui ne m'a jamais laissé tombé et qui a su garder une patience et une affection à toute épreuve. Je ne serais jamais assez reconnaissante.

Merci à ma famille, mon père qui m'a montré qu'on pouvait tout réussir en travaillant, mes soeurs qui resteront toujours ma source d'inspiration et ma mamie qui a toujours cru en moi et m'a encouragé à donner le meilleur de moi-même en toutes circonstances.

Efin, merci à ma copine d'avoir donné autant de temps et d'énergie à me supporter, d'être restée jusqu'à 22h au labo à surveiller derrière mon épaule l'avancée de ma rédaction, de m'avoir remonté le moral avec des Snickers à gogo, ou encore d'avoir toujours été là lorsque je pensais ne jamais m'en sortir. Merci de m'avoir encouragée et de m'avoir soutenue jusqu'à la fin. Je prend le relais!

J'ai une dernière pensée, mais non des moindres, à ma maman, qui je l'espère aurait été fière de moi.

Table des matières

Affidavit	2
Liste de publications et participation aux conférences	3
Résumé	4
Abstract	6
Table des matières	8
Table des figures	10
Liste des tableaux	17
Liste des acronymes	19
Introduction	21
1 Principe de détection et applications	23
1.1 Interaction rayonnement-matière	24
1.1.1 Spectre électromagnétique	24
1.1.2 Interaction des photons dans la matière	25
1.1.3 Optique géométrique	29
1.2 Détection des rayons gamma	37
1.2.1 Détection indirecte des rayons gamma	38
1.2.2 Photodétection de photons Tcherenkov et de scintillation	41
1.2.3 Résolutions associées aux détecteurs de rayons gamma	47
1.3 Applications de la détection en coïncidence hautement résolue en temps	47
1.3.1 Tomographie par émission de positrons (TEP)	47
1.3.2 Imagerie Compton	53
1.3.3 Imagerie temporelle des gamma prompts (PGTI)	53
1.3.4 LIDAR	54
1.4 Le projet ClearMind	54
2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince	60
2.1 Passivation du cristal et conséquence	61
2.2 Calcul de la transmittance théorique et implémentation dans Geant4	62
2.2.1 Calcul théorique des réflexions multiples au sein d'un matériau	62

2.2.2	Implémentation d'une nouvelle fonction dans le logiciel Geant4 : CoatedDielectricDielectric()	65
2.3	Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et vali- dation de la simulation Monte Carlo	67
2.3.1	À travers une interface simple et une interface composée d'une couche mince	68
2.3.2	À travers un cristal de PWO pourvu d'une couche mince	72
2.3.3	À travers un cristal suivi d'une photocathode	76
2.4	Estimation de l'absorbance d'une photocathode	82
2.4.1	Définition de l'absorbance	82
2.4.2	Impact de différents paramètres sur la variation de l'absorbance en fonction de la longueur d'onde	83
2.4.3	Importance de la transmission frustrée	86
3	Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince	88
3.1	Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.	89
3.1.1	Détermination de l'indice de réfraction du PWO par l'équation de Sellmeier	89
3.1.2	Détermination de la longueur d'atténuation du PWO	93
3.1.3	Validation de l'implémentation du phénomène d'interférences à travers une couche mince dans Geant4	96
3.2	Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.	97
3.2.1	Présentation des paramètres de l'expérience.	98
3.2.2	Analyse des résultats	102
4	Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4	108
4.1	Modélisation Monte Carlo du module de détection ClearMind	109
4.2	Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation	112
4.2.1	Résolution en énergie	115
4.2.2	Résolution temporelle de la coïncidence ou CTR	119
4.2.3	Résolution spatiale	124
4.2.4	Tableau récapitulatif	128
	Conclusion	131
	Bibliographie	133

Table des figures

1.1	Représentation du spectre électromagnétique.	25
1.2	Interaction des photons dans la matière en fonction de leur énergie et des caractéristiques du milieu.	26
1.3	Illustration (a) de l'effet photoélectrique et (b) de la diffusion Compton.	27
1.4	Illustration (a) de la diffusion Rayleigh et (b) de la création de paires.	28
1.5	Illustration de la réflexion (a) et de la réfraction (b) entre deux milieux d'indices de réfraction différents.	32
1.6	Illustration des phénomènes d'interférences au sein d'une couche mince d'épaisseur d (en orange) séparant un milieu 1 (bleu) et un milieu 3 (rouge), pour un angle d'incidence inférieur à l'angle limite.	36
1.7	Illustration d'une onde évanescente se formant dans le second milieu suite à une réflexion totale sur le plan d'interface entre les milieux 1 et 2. Cette onde évanescente est à l'origine de la transmission frustrée dans le troisième milieu. Dans ce cas, nous avons $n_2 < n_1$, $n_2 < n_3$ et $\theta_1 > \theta_L$	37
1.8	Illustration d'une interaction photoélectrique et du réarrangement du cortège électronique par émission d'un rayon X de fluorescence (voie a) ou émission d'un électron Auger (voie b) [Megane FOLLIN 2020].	39
1.9	Illustration du cône lumineux créé lors de l'effet Tcherenkov. La particule chargée se déplace avec une vitesse supérieure à la vitesse de la lumière dans ce milieu. Chaque point de sa trajectoire est la source d'une onde sphérique. L'ensemble de ces ondes forment un front d'onde qui se déplace à la vitesse de la particule avec un angle d'ouverture dont le cosinus vaut $\frac{c}{nv}$ [Clotilde CANOT 2018].	41
1.10	Illustration (a) du fonctionnement des photodiodes et (b) photographie d'une photodiode.	42
1.11	Illustration (a) du fonctionnement du PMT et (b) photographie d'un PMT.	44
1.12	Illustration (a) du fonctionnement du MCP-PMT et (b) photographie d'un MCP-PMT.	46
1.13	Illustration de (a) l'examen TEP et (b) une imagerie obtenue par TEP/CT.	49
1.14	Illustration des deux facteurs physiques limitant la résolution spatiale : la distance parcourue par le positron dans le corps du patient avant annihilation, et la non-colinéarité des deux photons d'annihilation. [LECOMTE 2009].	50

1.15	Schéma du principe de la TEP à temps-de-vol permettant de localiser le point d'annihilation le long de la LOR. Sans l'utilisation du temps-de-vol (histogramme <i>Sans TOF</i>), l'information résultant de la détection d'une coïncidence sur une LOR est distribuée uniformément à tous les pixels de la LOR. Grâce à la mesure du temps de vol donné par $t_2 - t_1$, (histogramme <i>Avec TOF</i>), il est possible de localiser le point d'annihilation sur la LOR à une distance Δl du centre de la LOR et avec une distribution de largeur à mi-hauteur proportionnelle à la CTR.	51
1.16	Illustration du détecteur ClearMind [YVON, SHARYY, M. FOLLIN et al. 2020]. Le cristal <i>scintronique</i> est représenté en bleu, la photocathode, déposée directement sur le cristal, en rouge, et le tout est encapsulé dans un MCP-PMT représenté en gris. L'électron (en bleu foncé) mis en mouvement par l'interaction du photon d'annihilation (en jaune) génère la production de photons de scintillation (en vert) et de photons Tcherenkov (en rouge), à l'origine d'un photoélectron crée dans la photocathode, qui est multiplié dans un micro-canal du MCP-PMT pour créer une impulsion électrique collectée par une ligne de transmission en contact avec le plan d'anode densément pixellisé situé en aval du MCP-PMT.	56
1.17	Indice de réfraction ordinaire et extraordinaire (a) et spectre d'émission scintillante (b) du PWO.	56
1.18	Illustration simplifiée du parcours du signal en sortie du MCP-PMT, du plan d'anode aux amplificateurs en passant par les lignes à transmission. Ce schéma est extrait de la thèse de Mégane Follin [Megane FOLLIN 2020].	58
2.1	Indices de réfraction des différents matériaux utilisés dans ce manuscrit ([HUANG et SEO 2007] pour le PWO, [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG et al. 2006] pour la photocathode, [POLYANSKIY 2023] pour l' Al_2O_3 et le TiO_2 et [MALITSON 1965] pour le SiO_2	62
2.2	Schéma d'un cristal (en bleu) passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par des couches minces (en jaune). Les couches minces sont alors considérées comme des interfaces, et non pas comme des milieux de propagation.	63
2.3	(a) Schéma des trajectoires et (b) exemples de <i>tracking</i> de photons utilisant la nouvelle fonctionnalité implémentée dans Geant4.	67
2.4	Transmittance théorique de photons d'incidences normales sur une interface (a) air/PWO et (b) PWO/photocathode avec (trait continu et marqueurs pleins) et sans (traitillé et marqueurs vides) couche mince de 100 nm d'épaisseur.	69
2.5	Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) de photons de 500 nm polarisés perpendiculairement (TE) ou parallèlement (TM) au plan d'incidence ou non-polarisés (NoP) en fonction de l'angle d'incidence sur une interface (a) air/PWO et (b) PWO/photocathode à travers une couche mince de 100 nm d'épaisseur.	70

2.6	Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) de photons d'incidences normales sur une interface entre deux prismes d'indice de réfraction 1.5, en fonction de l'épaisseur de la couche mince d'air les séparant, pour une longueur d'onde de 500 nm.	71
2.7	Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) de photons d'incidences normales sur une interface (a) air/PWO et (b) PWO/photocathode en fonction de l'épaisseur de la couche mince d'Al ₂ O ₃ pour une longueur d'onde de 500 nm.	72
2.8	Indices de réfraction ordinaires et extraordinaires du PWO tirés de la littérature. Les marqueurs croix et les marqueurs ronds représentent les mesures d'indice ordinaire et extraordinaire, respectivement. Les courbes d'indices ordinaires apparaissent en trait continu et les courbes d'indices extraordinaires en traitillés. Dans leur article [HUANG et SEO 2007], les auteurs effectuent les mesures sur un cristal non-dopé et déterminent une formule modifiée de l'équation de Sellmeier permettant d'exprimer l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde à partir des coefficients de Sellmeier (Eq 3.1). Les mesures représentées par les marqueurs verts ont été effectuées par Baccaro <i>et al.</i> [BACCARO, L M BARONE, BORGIA et al. 1995] sur un cristal non-dopé de 23 cm de long et ont été réutilisées par Chipaux qui détermine une relation entre l'indice de réfraction et la longueur d'onde [CHIPAUX 1995]. La bande rouge représente les indices de réfraction étudiés dans cette section. .	73
2.9	Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) en fonction de la longueur d'onde de photons non-polarisés d'incidences normales sur un cristal de PWO passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par une couche mince de 100 nm d'épaisseur (a) sans et (b) avec atténuation dans le PWO. La transmittance est étudiée pour différentes valeurs de l'indice de réfraction variant de 0% de l'indice ordinaire (<i>n extraordinaire</i>) à 100% de l'indice ordinaire (<i>n ordinaire</i>). La longueur d'absorption du cristal en fonction de la longueur d'onde est tirée de l'étude d'Annenkov <i>et al.</i> [ANNENKOV, KORZHIK et LECOQ 2002].	74
2.10	Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) en fonction de la longueur d'onde de photons non-polarisés d'incidences normales sur un cristal de PWO passivé par une couche mince d'Al ₂ O ₃ sur ses faces d'entrée et de sortie (a) pour des épaisseurs de 0 à 150 nm par pas de 25 nm et (b) pour des épaisseurs de 15 à 25 nm par pas de 2 nm.	75
2.11	(a) Indices de réfraction des trois modèles de photocathodes étudiées et (b) transmittances obtenues en fonction du modèle de photocathode.	78

2.12	Schéma représentant le détecteur (cristal de PWO passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par une couche mince d'Al ₂ O ₃ de 100 nm d'épaisseur, suivi d'une photocathode d'après le modèle de Harmer <i>et al.</i>) et les trajectoires de 30 photons générés à l'entrée du cristal avec une longueur d'onde de 500 nm et une incidence normale. Lors de ces simulations, on considère une atténuation nulle du cristal afin de pouvoir analyser complètement la trajectoire des photons. Pour chaque figure, la rugosité des faces d'entrée et de sortie du cristal varie entre (a) Poli, (b) <i>SigmaAlpha</i> de 10°, (c) <i>SigmaAlpha</i> de 20°, (d) <i>SigmaAlpha</i> de 30° et (e) <i>SigmaAlpha</i> de 80°	79
2.13	Distribution angulaire normalisée de la normale à la facette selon la rugosité de la surface.	80
2.14	Transmittance déduite après simulation Monte Carlo de photons non-polarisés sur un cristal passivé par une couche mince d'Al ₂ O ₃ de 100 nm d'épaisseur et suivi d'une photocathode bialcaline (a) en fonction de la longueur d'onde, pour une incidence normale et pour différentes rugosités des faces d'entrée et de sortie du cristal et (b) en fonction de l'angle d'incidence pour des faces du cristal polies et pour des longueurs d'onde de 300 et 700 nm.	81
2.15	(a) Probabilité d'atténuation des photons de 500 nm en fonction de l'épaisseur de la photocathode et (b) absorbance en fonction de la longueur d'onde des photons pour différentes épaisseurs de photocathodes décrites par le modèle de Harmer <i>et al.</i> [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG et al. 2006].	84
2.16	(a) Coefficient d'extinction en fonction de la longueur d'onde pour trois modèles de photocathodes et (b) Absorbance de photons non-polarisés en fonction de la longueur d'onde pour trois modèles de photocathodes. La structure étudiée est composée d'un cristal de PWO passivé par une couche mince d'Al ₂ O ₃ de 100 nm d'épaisseur suivi de la photocathode.	86
2.17	Absorbance de photons non-polarisés en fonction de la longueur d'onde avec et sans transmission frustrée à travers une couche mince d'Al ₂ O ₃ de 100 nm d'épaisseur.	86
3.1	Mesures de transmittance d'un cristal de PWO nu (sans couche mince), de deux cristaux passivés sur leurs faces d'entrée et de sortie par des couches minces d'oxyde d'aluminium (Al ₂ O ₃ - 1 et 2) et de deux cristaux passivés par des couches minces d'oxyde de titane (TiO ₂ - 1 et 2).	90
3.2	(a) Transmittances théoriques et (b) indice de réfraction du PWO ajusté lors du premier <i>fit</i>	92

3.3	Variation de l'indice de réfraction en fonction de l'écart-type de l'ajustement des coefficients de Sellmeier (a) <i>A</i> , (b) <i>B</i> , (c) <i>C</i> et (d) <i>D</i> . La courbe épaisse rouge correspond à l'indice de réfraction moyen obtenu par le <i>fit</i> . La variation de cet indice de réfraction causé par la variation de plus ou moins un écart-type pour chaque coefficient de Sellmeier est représentée par la zone rouge clair.	93
3.4	(a) Comparaison des transmittances théorique T_s et mesurée T et (b) détermination de longueur d'atténuation en fonction de la longueur d'onde dans le cas d'un cristal nu de PWO de 5 mm d'épaisseur.	94
3.5	Transmittances théoriques (traitillé) résultant du premier <i>fit</i> pour les longueurs d'onde supérieures à 400 nm et de la longueur d'atténuation du PWO, comparées aux transmittances mesurées (trait continu) à travers un cristal nu de 5 mm d'épaisseur.	94
3.6	(a) Transmittances théoriques et (b) indice de réfraction du PWO déduits du deuxième <i>fit</i>	95
3.7	Longueur d'atténuation en fonction de la longueur d'onde obtenue à partir du rapport entre la transmittance théorique calculée sans prendre en compte l'atténuation du cristal, et pour des coefficients de Sellmeier déduits du deuxième ajustement, et la transmittance mesurée.	96
3.8	Transmittances mesurées en fonction de la longueur d'onde (trait) et estimée d'après la simulation Monte Carlo (marqueurs) de 50 000 photons non-polarisés normalement sur la face avant d'un cristal de PWO nu (en bleu), passivé par des couches minces d'oxyde d'aluminium (en orange) et par des couches minces d'oxyde de titane (en vert). L'indice de réfraction et la longueur d'absorption utilisés sont ceux déduits de la Section 3.1.2. L'épaisseur des cristaux de PWO est de 5 mm. Pour faciliter la lecture graphique avec les barres d'erreur, les deux échantillons sont séparés sur deux figures différentes avec (a) l'échantillon 1 et (b) l'échantillon 2.	97
3.9	Photographie des cellules tests. A gauche la cellule test de contrôle (SiO_2) et à droite la cellule test de mesure (PWO).	98
3.10	Schéma en coupe des cellules tests (a) de contrôle et (b) de PWO réalisée par Photek, Ltd. La cellule test est un cylindre dont le cristal a une épaisseur de 5 mm et un diamètre de 20 mm. Avec l'encapsulation à l'indium, la cellule test mesure 40.9 mm de diamètre.	99
3.11	Schéma du parcours du faisceau lumineux à travers la cellule test de contrôle.	100
3.12	Schéma complet du dispositif expérimental permettant la mesure de la PDE de la photocathode de référence et des cellules tests.	101
3.13	(a) Schéma optique et (b) photographie du banc optique permettant la mesure de la PDE à travers la photocathode de référence et les cellules tests.	102
3.14	(a) Flux incident et (b) et sensibilité des cellules tests mesurés en fonction de la longueur d'onde.	103

3.15	Variation de (a) la PDE, (b) la transmittance T , (c) l'efficacité quantique, (d) l'absorbance A , (e) la probabilité d'atténuation P_{att} et (f) la probabilité d'extraction P_{ext} en fonction de la longueur d'onde déterminées pour les cellules tests de SiO_2 et de PWO, dans le cas d'une épaisseur des couches minces d'oxyde d'aluminium de 70 et 100 nm.	106
4.1	Schéma de la modélisation Monte Carlo du module de détection ClearMind.	109
4.2	Composantes (a) p_x (b) p_y (c) p_z du vecteur directeur des photons d'annihilation des coïncidences détectées provenant de la source.	109
4.3	Propriétés de la photocathode bialcaline bleue utilisée [MOTTA et SCHÖNERT 2005]. L'indice de réfraction n'étant défini qu'à partir de 380 nm, nous le considérons comme constant pour des longueurs d'onde inférieures.	111
4.4	Simulation des temps de détection de la modélisation.	113
4.5	Distribution du nombre de photons générés par évènement dans le détecteur gauche	115
4.6	Distribution du nombre de photon détectés (photoélectrons) pour le détecteur gauche, dans le cas (a) témoin (Al_2O_3 - 100 nm) et (b) idéal (Dépôt direct). Le fit orange correspond à la somme d'un polynôme du premier degré Compton (bleu) et d'une gaussienne.	116
4.7	(a) Nombre de photoélectrons et (b) résolution en énergie dans chaque cas étudié.	116
4.8	(a) Indice de réfraction et (b) transmittance pondérée par l'angle d'incidence pour chaque cas étudié.	118
4.9	Distribution du temps de vol (différence de temps de détection) pour le cas témoin (Al_2O_3 - 100 nm) dont la largeur à mi-hauteur correspond à la CTR.	119
4.10	Temps d'émission des photons de scintillation. Les arguments p_0 , p_1 , p_2 et p_3 correspondent aux paramètres A , B , $-\frac{1}{\tau_f}$ et $-\frac{1}{\tau_s}$ de l'Eq. 4.6, respectivement.	121
4.11	Signaux reçus aux extrémités des TL du détecteur gauche, pour un des évènements de la simulation témoin (a) complète et (b) Tcherenkov uniquement du cas témoin. Chaque courbe représente le signal reçu sur une des extrémité d'une TL. Le signal est composé d'un pic principal et d'un deuxième pic résultant de la réflexion sur les connecteurs de la TL [Chi-Hsun SUNG 2022].	121
4.12	CTR calculées pour tous les cas étudiés. La partie supérieure correspond à la simulation complète et la partie inférieure correspond à la simulation Tcherenkov.	122
4.13	Démonstration de l'impact sur la CTR de la coupure sur le nombre minimum de TL.	123
4.14	Illustration de la répartition spatiale des photoélectrons pour un évènement [Chi-Hsun SUNG 2022].	126

4.15 Distribution de la différence entre la position reconstruite et la position de la vérité Monte Carlo, pour le cas témoin (Al_2O_3 - 100 nm) (a) selon x et (b) selon y.	127
4.16 Résolutions spatiales (a) selon x et (b) y pour tous les cas étudiés. . . .	127

Liste des tableaux

1.1	Modes de propagation de l'onde en fonction de sa polarisation et de l'orientation de l'axe optique du milieu biréfringent par rapport au plan d'interface entre le vide et le milieu biréfringent.	31
1.2	Expressions des coefficients de réflexion et de transmission de Fresnel entre deux milieux i et j . θ_i et θ_j sont respectivement les angles d'incidence et de transmission. n_i et n_j les indices de réfraction des milieux i et j , respectivement, qui dépendent de la longueur d'onde λ . Notons que si $n_i < n_j$, nous sommes toujours dans le cas $\theta_i < \theta_L$ (pas d'angle limite).	33
1.3	Caractéristiques de quelques scintillateurs [LECOMTE 2009], [P. LECOQ 2006], [WILLIAMS, ROSE, LEE et al. 1996], [JELLISON, BOATNER, RAMEY et al. 2012], [MAO, L. ZHANG et R.-Y. ZHU 2007], [POLYANSKIY 2023]. ρ est la densité du cristal, Z_{eff} son numéro atomique effectif, μ_{PE} le coefficient d'atténuation linéique de l'interaction photoélectrique à 511 keV, LY (<i>Light Yield</i>) le rendement de scintillation, τ la constante de déclin moyenne de la scintillation, λ_{max} la longueur d'onde au maximum du pic d'émission lumineuse et n_{max} son indice de réfraction à λ_{max}	39
1.4	Résumé des caractéristiques des photodétecteurs [Megane FOLLIN 2020], [Chi-Hsun SUNG 2022], [PUILL et IN 2021]. τ est le temps de montée du signal. SPTR (<i>Single Photon Time Resolution</i>) et TTS (<i>Transit Time Spread</i>) sont la résolution temporelle au photon unique des APD et des SiPM et l'étalement du temps de transit des électrons dans les PMT et les MCP-PMT, qui conditionnent la résolution temporelle du photodétecteur. DCR (<i>Dark Count Rate</i>) est le taux de comptage d'obscurité et PDE (<i>Photon Detection Efficiency</i>) et QE (<i>Quantum Efficiency</i>) sont l'efficacité de détection au photon unique des APD et des SiPM et l'efficacité quantique des photocathodes des PMT et des MCP-PMT.	46
2.1	Statistique des distributions de la normale à la facette selon la rugosité de la surface.	80

3.1	Coefficients de Sellmeier correspondants aux indices de réfraction ordinaires et extraordinaires obtenus Huang et Seo [HUANG et SEO 2007] et Bacacro <i>et al.</i> [BACCARO, L M BARONE, BORGIA et al. 1995]. Les courbes d'indices de réfractions obtenus par les auteurs sont illustrées sur la Figure 2.8. Les coefficients de Sellmeier dans le cas de Bacarro/Chipaux ont été obtenus par un ajustement de la formule de Chipaux à la formule de Huang et Seo (Eq 3.1). A est sans unité, B et C en μm^2 et D en μm^{-2} .	90
3.2	Résultats du premier <i>fit</i> sur les longueurs d'onde supérieures à 400 nm (Section 3.1.1) et du second <i>fit</i> effectué à partir de 300 nm et qui prend en compte l'atténuation dans le PWO (Section 3.1.2). A est sans unité, B et C en μm^2 , et D en μm^{-2} . Le χ^2_{ν} est le χ^2 réduit.	91
4.1	Tableaux récapitulatifs des différents cas étudiés. Pour chaque simulation, un seul paramètre surligné en gris parmi le matériau ou l'épaisseur de la couche mince (CM), la rugosité de l'interface <i>crystal/air</i> , le couplage par gel optique du cristal à la photocathode, la prise en compte de la transmission frustrée à travers la couche mince (FTIR) ou l'efficacité quantique (QE) de la photocathode varie par rapport au cas témoin apparaît en gris dans le tableau. On note qu'il n'y a pas d'atténuation dans la couche mince quel que soit le matériau.	114
4.2	Tableaux comparatif des résolutions temporelles de la coïncidence (CTR) obtenues pour chaque cas étudié. La première colonne correspond aux CTR mesurées sans coupure sur le nombre de TL. La seconde colonne correspond aux CTR mesurées lorsque le nombre minimum de TL de chaque MCP-PMT est de 12. Le rapport du nombre d'évènements correspondant sur le nombre de coïncidence total est représentée entre parenthèse pour chaque cas étudié.	125
4.3	Tableaux récapitulatif de la résolution en énergie, du CTR et des résolutions spatiales obtenues pour chaque cas étudié. Les CTR sont calculées dans le cas d'une simulation complète (émission de photons de scintillations et de photons Tcherenkov) et dans le cas d'une simulation Tcherenkov (émission de photons Tcherenkov seulement). Les deux valeurs qui suivent la CTR représentent respectivement la <i>fraction de photons détectés</i> (en %), c'est-à-dire le nombre de photons détectés sur le nombre de photons générés dans le cristal, et la <i>fraction d'évènements photoélectriques</i> (en %), c'est-à-dire le nombre d'évènements photoélectriques à l'origine d'une coïncidence (c'est-à-dire le nombre d'évènements pour lesquels les deux photons d'annihilation ont interagi par effet photoélectrique dans les cristaux de PWO), par rapport aux 2.5 millions d'évènements simulés.	130

Liste des acronymes

CTR

résolution temporelle de la coïncidence (ou *Coincidence Time Resolution*). 39

DOI

profondeur d'interaction (ou *Depth Of Interaction*). 38

FTIR

transmission frustrée (ou *Frustrated Total Internal Reflection*). 25

FWHM

largeur à mi-hauteur (ou *Full Width at Half Maximum*). 36

LAL

longueur d'atténuation (ou *Light Attenuation Length*). 82

MCP-PMT

tube photo-multiplicateur à galette de micro-canaux (ou *Micro-Channel Plate - Photo-Multiplier Tube*). 33

PDE

efficacité de détection d'un photon (ou *Photon Detection Efficiency*). 85

PMT

tube photo-multiplicateur (ou *Photo-Multiplier Tubes*). 32

PWO

tungstate de plomb (PbWO_4). 44

QE

efficacité quantique (ou *Quantum Efficiency*). 32

SiPM

photo-multiplicateurs en silicium. 32

SNR

rapport signal sur bruit (ou *Signal to Noise Ratio*). 41

TE

électrique transverse (ou *Transverse Electric*). 20

TEP

tomographie par émission de positrons. [36](#)

TL

lignes de transmission (ou *Transmission Lines*). [44](#)

TM

magnétique tranverse (ou *Transverse Magnetic*). [20](#)

Introduction

La tomographie par émission de positrons (TEP) est une modalité d'imagerie utilisée en médecine nucléaire qui permet d'obtenir une image fonctionnelle du corps du patient. Elle rend notamment possible la localisation des zones tumorales grâce à leur marquage par un radiotraceur et à la détection en coïncidence des paires de photons d'annihilation, issus de sa désintégration, par une couronne de détecteurs placés autour du patient. La TEP à temps-de-vol (TOF) exploite en plus la différence entre les temps de détection des photons d'annihilation, ce qui permet d'améliorer le rapport signal sur bruit des images reconstruites.

La performance d'une caméra TEP se décrit à la fois par sa résolution spatiale et sa sensibilité, laquelle est caractérisée par une courbe de taux de comptage équivalent bruit (NEC) dont la racine carrée détermine la qualité de l'image reconstruite, c'est-à-dire son rapport signal-sur-bruit (SNR). Par ailleurs, la mesure du TOF permet d'améliorer le SNR de telle sorte que le NEC, pour un SNR donné, est inversement proportionnel à la résolution temporelle de la coïncidence (CTR). Donc l'amélioration des performances de la TEP à temps-de-vol dépend de l'amélioration de la résolution temporelle des détecteurs. Cela est possible par exemple en augmentant le nombre de photons rapides détectés, en particulier les photons Tcherenkov qui sont émis pratiquement instantanément suite à la dépolarisation rapide engendrée par le passage d'un électron généré par l'interaction du rayon gamma dans le détecteur.

Le projet ClearMind [YVON, SHARYY, M. FOLLIN et al. 2020], dans lequel ce travail de thèse s'inscrit, cherche à développer un détecteur innovant, avec pour objectif une résolution spatiale inférieure à 4 mm^3 FWHM et une CTR inférieure à 100 ps FWHM. Ce détecteur est constitué d'un cristal dit *scintronique*, c'est-à-dire qui allie scintillation et génération de photoélectrons grâce au dépôt d'une photocathode bialcaline directement sur le cristal, ce qui permet d'éviter les réflexions totales à l'interface entre le cristal et le photodétecteur. Le matériau choisi pour le cristal est le tungstate de plomb (PWO) pour sa densité, qui lui confère une grande efficacité de détection, et son faible rendement de scintillation, qui permet de ne pas noyer l'émission Tcherenkov dans un flot de lumière scintillante. Afin de protéger la photocathode de l'altération par le PWO, le cristal doit être passivé par une couche mince d'oxyde qui induit des phénomènes d'interférences et la possibilité de transmission frustrée des photons de scintillation et des photons Tcherenkov. Les coefficients de transmission et de réflexion à travers une couche mince sont différents des coefficients de Fresnel à travers une interface simple, et c'est la compréhension de l'impact de cette couche de passivation sur la résolution spatiale et la CTR qui a motivé ce travail.

La modélisation des propriétés des couches minces étant indispensable à la simulation du module de détection ClearMind, une nouvelle méthode a été intégrée dans le

logiciel de simulation Monte Carlo Geant4, appelée `CoatedDielectricDielectric`. Celle-ci consiste à modéliser le transport optique des photons à travers une interface composée d'une couche mince, à partir des coefficients de réflexion et de transmission calculés pour une épaisseur de la couche mince donnée et dont l'indice de réfraction est connu.

Ce manuscrit de thèse présente l'étude menée sur la transmission de lumière à travers une couche mince, et son impact sur les performances du module de détection ClearMind. Il comprend quatre chapitres, qui sont décrits ci-dessous.

Dans le premier chapitre, nous introduirons le phénomène de transmission frustrée et nous présenterons les calculs des coefficients de réflexion et de transmission à travers une couche mince, en tenant compte des phénomènes d'interférences. Nous ferons également l'état de l'art des systèmes de détection et des différentes modalités d'imagerie à haute résolution temporelle.

Dans le second chapitre, nous étudierons en détail l'évolution de la transmittance à travers différentes structures composées d'une couche mince. Cette étude sera menée en fonction de différents paramètres, tels que la longueur d'onde, l'angle d'incidence, l'épaisseur de la couche de passivation, et les propriétés optiques des matériaux (indice de réfraction et longueur d'absorption du cristal de PWO et de la photocathode). La transmittance théorique sera comparée aux résultats obtenus par la simulation Monte Carlo, rendue possible grâce à la méthode `CoatedDielectricDielectric`, développée et intégrée dans la version 11.1 de Geant4.

Le troisième chapitre nous permettra de déterminer les propriétés optiques des matériaux utilisés et de valider l'implémentation de cette nouvelle méthode grâce à la comparaison entre les transmittances théoriques, les mesures et les résultats obtenus par simulation Monte Carlo. Dans un premier temps, les mesures de transmittance à travers soit un cristal nu soit des cristaux passivés sur leurs faces d'entrée et de sortie par des couches minces de différents matériaux nous permettront de déterminer par ajustement les propriétés optiques du cristal de PWO. Dans un second temps, les mesures de l'efficacité de détection à travers des cellules tests nous permettront de déduire les caractéristiques de la photocathode, telles que son efficacité quantique et sa probabilité d'extraction.

Enfin, le dernier chapitre consistera en la simulation complète du module de détection ClearMind avec le logiciel Geant4, à partir du code développé par Sung [Chi-Hsun SUNG 2022], [C.-H. SUNG, CAPPELLUGOLA, M. FOLLIN et al. 2023]. L'analyse du signal reçu par les lignes de transmission nous permettra d'étudier la résolution en énergie, la CTR et la résolution spatiale, en fonction des paramètres de notre détecteur, tel que le matériau ou l'épaisseur de la couche mince. Le rôle de la transmission frustrée à travers la couche de passivation sera également développé dans ce chapitre.

Nous terminerons ce manuscrit en discutant les caractéristiques optimales de chacun des composants du module de détection ClearMind et nous mettrons en parallèle les résolutions estimées par la modélisation avec les objectifs fixés par le projet. Enfin, nous concluerons sur la faisabilité du projet ClearMind et proposerons des axes d'amélioration.

1 Principe de détection et applications

Sommaire

1.1	Interaction rayonnement-matière	24
1.1.1	Spectre électromagnétique	24
1.1.2	Interaction des photons dans la matière	25
1.1.2.1	Effet photoélectrique	26
1.1.2.2	Effet Compton	27
1.1.2.3	Diffusion de Rayleigh	27
1.1.2.4	Création de paire (CP)	28
1.1.2.5	Loi de Beer-Lambert	28
1.1.3	Optique géométrique	29
1.1.3.1	Onde plane et relation de dispersion	29
1.1.3.2	Indice de réfraction et biréfringence	30
1.1.3.3	Lois de Snell-Descartes	31
1.1.3.4	Coefficients de Fresnel à travers une interface optique	32
1.1.3.5	Réflectance et transmittance à travers une couche mince	34
1.1.3.6	L'onde évanescence permet la transmission frustrée de l'onde	36
1.2	Détection des rayons gamma	37
1.2.1	Détection indirecte des rayons gamma	38
1.2.1.1	Scintillation et cristaux scintillants	38
1.2.1.2	Émission Tcherenkov	40
1.2.2	Photodétection de photons Tcherenkov et de scintillation	41
1.2.2.1	Photodiode (PD) et photodiode à avalanche (APD)	42
1.2.2.2	Photomultiplicateurs en silicium (SiPM)	43
1.2.2.3	Tubes photomultiplicateurs (PMT)	43
1.2.2.4	Tubes photomultiplicateurs à galettes de microcanaux (MCP-PMT)	44
1.2.3	Résolutions associées aux détecteurs de rayons gamma	47
1.3	Applications de la détection en coïncidence hautement résolue en temps	47
1.3.1	Tomographie par émission de positrons (TEP)	47
1.3.1.1	Résolution spatiale et temporelle d'une caméra TEP	49
1.3.1.2	TEP à temps de vol (TOF-PET)	51
1.3.1.3	Imagerie directe par émission de positons (dPEI)	53

1.3.2	Imagerie Compton	53
1.3.3	Imagerie temporelle des gamma prompts (PGTI)	53
1.3.4	LIDAR	54
1.4	Le projet ClearMind	54
1.4.0.1	PWO : scintillateur et radiateur Tcherenkov	55
1.4.0.2	Une photocathode déposée directement sur le cristal passivé par une couche mince d'oxyde	57
1.4.0.3	Un gain optimisé grâce au MCP-PMT et une lecture des signaux optimisée	57

Dans ce premier chapitre, nous présentons les différentes interactions entre une particule et la matière qu'elle traverse, les conséquences de cette interaction, ainsi que les comportements possibles de la particule au contact d'une interface. Nous développons ensuite les différentes techniques de détections des particules ainsi que leurs applications médicales. Pour finir, nous présentons le projet ClearMind dans lequel s'inscrit cette thèse, ainsi que les objectifs fixés.

1.1 Interaction rayonnement-matière

1.1.1 Spectre électromagnétique

Le spectre électromagnétique [GARING 1998], [BORN, WOLF, BHATIA et al. 1999] est la représentation du rayonnement électromagnétique en fonction de sa longueur d'onde, de sa fréquence ou des quanta d'énergie des photons qui le constituent. La relation entre l'énergie E , la fréquence ν et la longueur d'onde λ est donnée par :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.1)$$

avec $h = 6.63 \times 10^{-34}$ J s, la constante de Planck, et $c = 3.00 \times 10^8$ m s⁻², la vitesse de la lumière dans le vide.

L'étendue du spectre électromagnétique tel que nous le connaissons aujourd'hui (Figure 1.1) ne date que du XX^e siècle, grâce à la découverte des rayons gammas par Paul Villard. Avant cela, William Herschel et Johann Wilhelm Ritter au XVIII^e siècle ainsi que Heinrich Hertz et Wilhelm Röntgen au XIX^e siècle, avaient découvert l'existence des rayonnements infrarouge, ultra-violet, des ondes radio et des rayons X, respectivement. Historiquement, la première partie connue du spectre électromagnétique était constituée de la lumière visible, appelée également *spectre optique*, qui s'étend du violet (380 nm, soit 3,27 eV) au rouge (780 nm, soit 1,59 eV).

Au XVII^e et XVIII^e siècle, deux théories de la lumière s'affrontaient, l'une corpusculaire portée notamment par Isaac Newton et l'autre ondulatoire par Christiaan Huy-

1 Principe de détection et applications – 1.1 Interaction rayonnement-matière

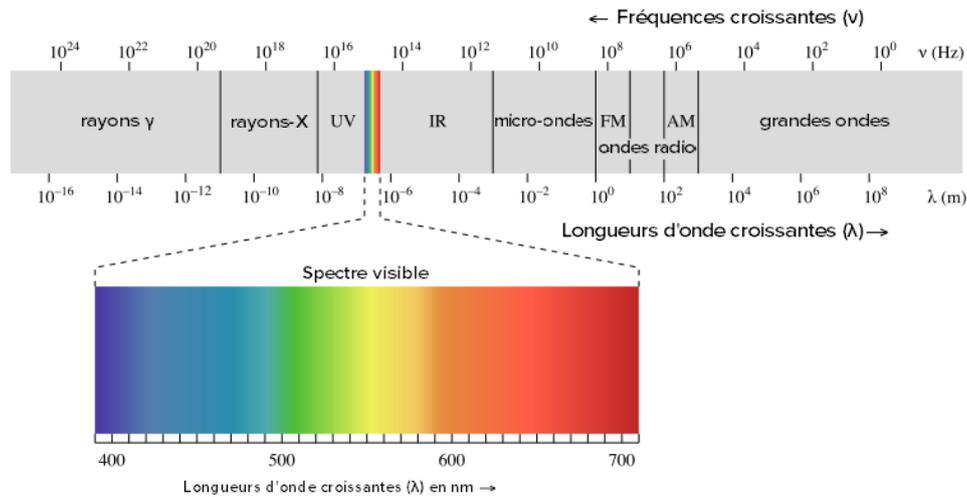


FIGURE 1.1 – Représentation du spectre électromagnétique.

gens. C'est seulement au XIX^e siècle que James Clerk Maxwell démontra pour la première fois que la lumière pouvait être décrite comme une perturbation d'un champ électromagnétique se propageant dans le vide. Ainsi, la lumière pouvait se comporter comme une particule ou comme une onde et cette dualité *onde-corpuscule* est, entre autres, devenue explicite avec la découverte de l'effet photoélectrique par Albert Einstein en 1905.

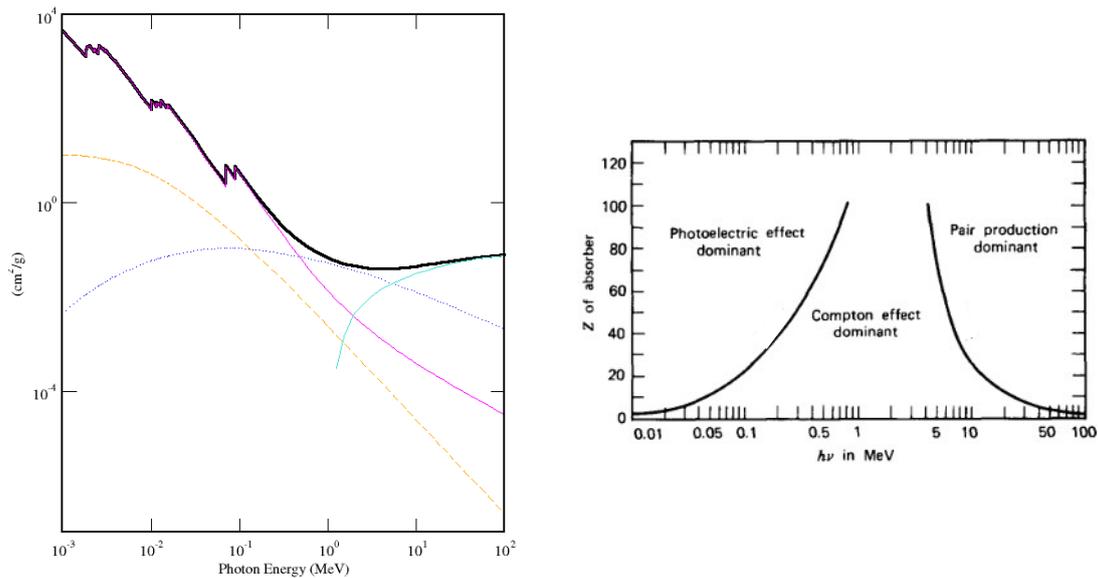
Dans le cadre de ce manuscrit, nous étudierons les interactions des photons pour des énergies allant du domaine visible au domaine du rayons gamma.

1.1.2 Interaction des photons dans la matière

Les photons peuvent interagir de différentes manières avec les électrons ou les noyaux des atomes qui composent la matière en fonction de leur énergie et des caractéristiques de la matière (Figure 1.2), à savoir soit par :

- effet photoélectrique,
- effet Compton,
- diffusion de Rayleigh,
- création de paire.

Ces différentes interactions sont brièvement décrites dans les parties qui suivent.



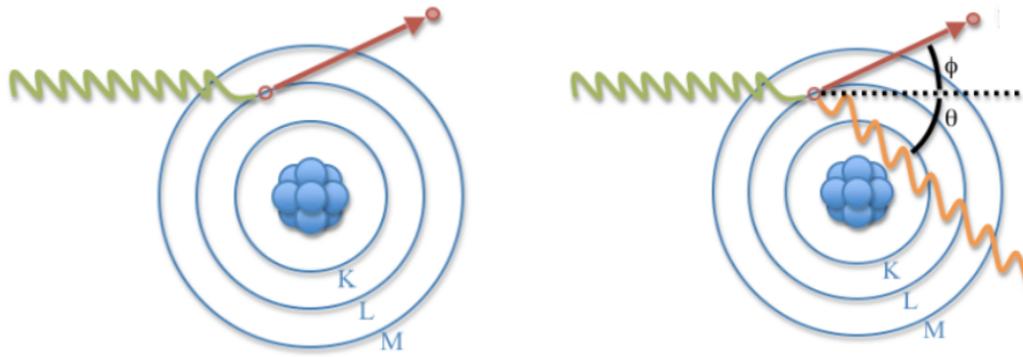
- (a) Coefficient d'atténuation massique, pour les différentes interactions du photon dans le PWO, en fonction de son énergie. La courbe rose correspond à l'effet photoélectrique, la courbe jaune à la diffusion Rayleigh, la courbe bleue la diffusion Compton et la courbe bleu à la création de paire. Enfin, la courbe noire correspond au coefficient d'atténuation massique total calculé à partir de [XCOM 2023].
- (b) Zone de prédominance des différentes interactions d'un photon d'énergie E (MeV) (en abscisse) dans un matériau de numéro atomique Z (en ordonnée) [KNOLL 2000].

FIGURE 1.2 – Interaction des photons dans la matière en fonction de leur énergie et des caractéristiques du milieu.

1.1.2.1 Effet photoélectrique

L'effet photoélectrique se produit lorsque le photon incident rentre en collision avec un électron d'une couche atomique interne (Figure 1.3a). Le photon est alors complètement absorbé et cède toute son énergie à l'électron atomique, qui est éjecté de la couche avec une énergie cinétique égale à l'énergie du photon moins l'énergie de liaison de l'électron sur sa couche atomique. L'atome réarrange alors ses couches électroniques pour combler la lacune laissée vacante, ce qui entraîne l'émission de rayons X de fluorescence ou d'électrons Auger (Figure 1.8).

La section efficace de l'effet photoélectrique diminue rapidement avec l'énergie du photon (Figure 1.2) et est proportionnelle à Z^n où Z est le numéro atomique de l'atome et n varie entre 4 et 5.



- (a) Représentation de l'effet photoélectrique. En vert, le photon incident. En rouge, le photoélectron éjecté de l'atome cible. Les couches atomiques K, L, M sont représentées autour du noyau de l'atome.
- (b) Représentation de l'effet Compton. En vert, le photon incident. En rouge, l'électron, et en orange, le photon diffusé par effet Compton, qui sont émis avec les angles ϕ et θ par rapport à la direction du photon incident, respectivement.

FIGURE 1.3 – Illustration (a) de l'effet photoélectrique et (b) de la diffusion Compton.

1.1.2.2 Effet Compton

Contrairement à l'effet photoélectrique, avec l'effet Compton le photon incident ne transmet qu'une partie de son énergie à un électron d'une couche périphérique de l'atome et le reste est emporté par un photon d'énergie $h\nu'$ diffusé avec un angle θ par rapport à la direction du photon incident (Figure 1.3b).

$$h\nu' = h\nu - T_e \quad (1.2)$$

avec $h\nu$ l'énergie du photon incident, T_e l'énergie cinétique de l'électron.

L'angle de diffusion θ dépend de l'énergie du photon incident $h\nu$ et de celle du photon diffusé $h\nu'$ et s'exprime de la manière suivante :

$$\cos(\theta) = 1 - m_e c^2 \left(\frac{1}{h\nu'} - \frac{1}{h\nu} \right) \quad (1.3)$$

où $m_e c^2 = 511 \text{ keV}$ est l'énergie de l'électron au repos.

L'effet Compton, ou diffusion incohérente, se produit pour des photons d'énergie moyenne de l'ordre de 0.1 à 10 MeV selon les caractéristiques du milieu (Figure 1.2a et 1.2b).

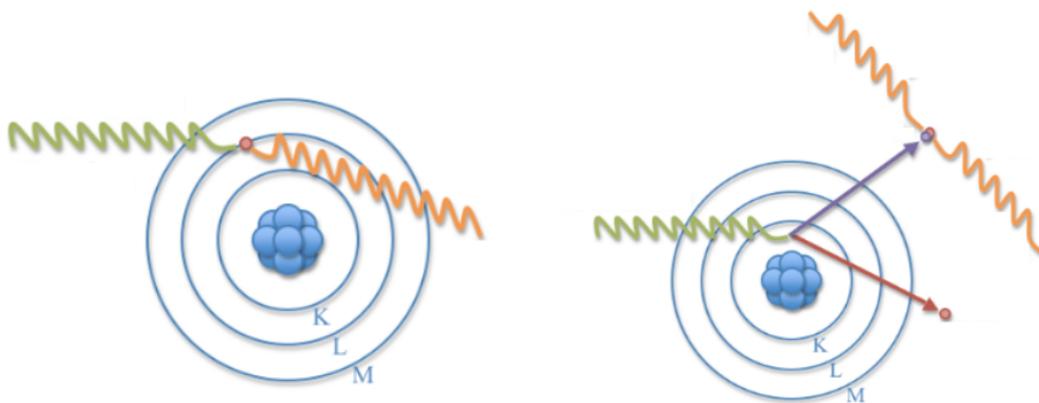
1.1.2.3 Diffusion de Rayleigh

La diffusion de Rayleigh, aussi appelée diffusion élastique ou cohérente, n'a aucun impacte sur l'énergie du photon incident. Celui-ci est simplement diffusé avec une probabilité inversement proportionnelle au carré de l'énergie du photon incident (Figure 1.4a).

1.1.2.4 Création de paire (CP)

La création de paire est possible lorsque l'énergie du photon est suffisante, c'est-à-dire au moins égale à l'énergie de masse au repos des deux particules créées, soit 1.022 MeV, et que l'énergie et la quantité de mouvement peuvent être conservées. Ceci n'est possible qu'au voisinage d'un noyau : le photon peut alors se matérialiser en une paire électron - positron, où le positron noté e^+ est l'anti-particule de l'électron (Figure 1.4b).

Après avoir perdu son énergie par diffusion coulombienne, le positron s'annihile avec un électron atomique, ce qui entraîne l'émission de deux photons d'annihilation de 511 keV à 180° l'un de l'autre. La Section 1.3.1 explique l'intérêt de l'annihilation électron - positron en imagerie médicale.



(a) Représentation de la diffusion de Rayleigh. En vert, le photon incident. En orange, le photon diffusé. Le photon est dévié de sa trajectoire sans perte d'énergie.

(b) Représentation de la création de paires. En vert, le photon incident. En rouge, l'électron, et en violet, le positron, qui sont créés lors de l'interaction. En orange, deux photons d'annihilation de 511 keV émis dos à dos lors de l'annihilation du positron avec un électron.

FIGURE 1.4 – Illustration (a) de la diffusion Rayleigh et (b) de la création de paires.

1.1.2.5 Loi de Beer-Lambert

Les différentes interactions citées précédemment contribuent à l'absorption des photons dans la matière. La probabilité d'absorption totale d'un photon dépend donc de la somme des probabilités de chacune des interactions, décrites par leur section efficace. La section efficace totale σ_{tot} , qui s'exprime en barns (1 barn = 10^{24} cm²), est donnée par :

$$\sigma_{tot} = \sigma_{Photoélectrique} + \sigma_{Compton} + \sigma_{Rayleigh} + \sigma_{CP} \quad (1.4)$$

Pour un milieu de masse volumique ρ caractérisé par son coefficient d'atténuation linéique μ exprimé en cm⁻¹ (c'est-à-dire la probabilité d'interaction du photon par

1 Principe de détection et applications – 1.1 Interaction rayonnement-matière

unité de distance parcourue), le coefficient d'atténuation massique exprimé en cm^2g^{-1} est donné par :

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{\mathcal{N}_A \sigma_{tot}}{A} \quad (1.5)$$

avec $\mathcal{N}_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ le nombre d'Avogadro et A la masse atomique du matériau exprimée en g mol^{-1} .

Le coefficient d'atténuation linéique dépend de l'énergie de la particule E et du milieu d'interaction. La profondeur d'interaction du photon dans un milieu est une variable aléatoire x décrite par la densité de probabilité $p(x)$ donnée par :

$$p(x) = \mu e^{-\mu(E)x} \quad (1.6)$$

Son espérance mathématique donnée par :

$$\mathbb{E}[x] = \frac{1}{\mu(E)} \quad (1.7)$$

correspond à la longueur d'atténuation des photons dans le milieu (c'est-à-dire la distance au delà de laquelle une fraction inférieure à $\frac{1}{e}$ des photons est transmise).

Pour un faisceau d'intensité I_0 , la loi d'atténuation exponentielle de Beer-Lambert (Eq 1.8) permet d'exprimer l'intensité $I(x)$ du faisceau ayant parcouru une distance x dans un milieu d'interaction :

$$I(x) = I_0 e^{-\mu(E)x} \quad (1.8)$$

Pour un milieu hétérogène, le coefficient d'atténuation linéique n'est pas constant mais dépend de la position. La loi de Beer-Lambert devient alors :

$$I(x) = I_0 e^{-\int_0^x \mu(E,x) dx} \quad (1.9)$$

1.1.3 Optique géométrique

L'optique géométrique permet d'étudier le trajet de la lumière et d'analyser son comportement dans le milieu et au passage d'une interface. Dans le cadre de ce travail, l'optique géométrique est importante pour étudier la collection des photons Tcherenkov et de scintillation au sein du détecteur.

1.1.3.1 Onde plane et relation de dispersion

Une onde EM plane homogène est définie par son vecteur d'onde noté \vec{k} et, sa pulsation $\omega = 2\pi\nu$.

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \text{Re}[\vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}] \quad (1.10)$$

Dans le vide, l'onde se propage à la vitesse de la lumière c , avec $k = \frac{\omega}{c}$ la relation de dispersion de l'onde dans le vide, où k est le nombre d'onde donné par la norme du

vecteur d'onde \vec{k} .

Dans un milieu diélectrique, la relation de dispersion est donnée par :

$$k = \frac{n\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{n}{\lambda_0} \frac{2\pi}{\lambda_0} \quad (1.11)$$

où $\underline{n} = \underline{n}(\lambda)$ est l'indice de réfraction du milieu, qui peut être complexe (Section 1.1.3.2), et λ_0 la longueur d'onde dans le vide.

L'onde EM a alors une vitesse de phase donnée par :

$$V_\phi = \frac{c}{n} \quad (1.12)$$

avec n la partie réelle de l'indice de réfraction complexe \underline{n} .

D'un point de vue corpusculaire, l'impulsion p d'un photon est donnée par :

$$p = \frac{h}{2\pi} k = \frac{h}{2\pi} \frac{\omega}{c} \quad (1.13)$$

La masse au repos d'une particule relativiste est donnée par :

$$m^2 = \left(\frac{E}{c^2}\right)^2 - \left(\frac{p}{c}\right)^2 \quad (1.14)$$

Pour un photon, c'est-à-dire une particule de masse nulle, on obtient :

$$E = pc = \frac{h}{2\pi} \omega = h\nu \quad (1.15)$$

1.1.3.2 Indice de réfraction et biréfringence

L'indice de réfraction $\underline{n}(\lambda) = n(\lambda) + i\kappa(\lambda)$ du milieu permet d'expliquer la plupart des comportements de la lumière au sein d'un milieu. C'est une grandeur complexe dont la partie réelle $n(\lambda)$ correspond à l'indice de réfraction du milieu et la partie imaginaire $\kappa(\lambda)$ au coefficient d'atténuation (aussi appelé coefficient d'extinction) de l'onde dans ce milieu.

En effet, pour une onde plane homogène (Eq 1.10) se propageant selon l'axe x dans un milieu de relation de dispersion $k = (n(\lambda) + i\kappa(\lambda)) \frac{2\pi}{\lambda_0}$:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \text{Re}[\vec{E}_0 e^{i(\frac{2\pi(n+i\kappa)}{\lambda_0} x - \omega t)}] = e^{-\frac{2\pi\kappa}{\lambda_0} x} \text{Re}[\vec{E}_0 e^{i(2\pi \frac{n}{\lambda_0} x - \omega t)}] \quad (1.16)$$

L'intensité étant proportionnelle au carré du champ électrique, nous retrouvons l'expression du coefficient d'atténuation linéique donné par :

$$\mu = \frac{4\pi\kappa}{\lambda_0} \quad (1.17)$$

Les milieux biréfringents uniaxes sont des matériaux diélectriques anisotropes qui

sont caractérisés par deux indices de réfraction : un indice ordinaire noté n_o et un indice extraordinaire noté n_e . L'axe optique d'un matériau biréfringent dépend de la structure cristalline du matériau. Il existe également des matériaux biréfringents *biaxes*, caractérisés par trois indices de réfraction, mais ces matériaux ne seront pas étudiés dans ce travail.

Ainsi, selon la direction du vecteur d'onde par rapport à l'axe optique, deux modes de propagation de l'onde se propagent dans le milieu avec un indice ordinaire n_o et un indice compris entre l'indice ordinaire n_o et l'indice extraordinaire n_e . Les modes de propagation pour les polarisations **électrique transverse (ou Transverse Electric) (TE)**, pour un vecteur champ électrique perpendiculaire au plan d'incidence, et **magnétique transverse (ou Transverse Magnetic) (TM)** pour un vecteur champ électrique parallèle au plan d'incidence, sont représentés dans la Table 1.1 selon que le plan d'interface défini par la face du cristal est perpendiculaire ou parallèle à l'axe optique du cristal.

	Axe optique perpendiculaire au plan d'interface		Axe optique parallèle au plan d'interface	
	Incidence normale	Incidence oblique	Incidence normale	Incidence oblique
TE	n_o	n_o	n_e	$[n_e - n_o]$
TM	n_o	$[n_e - n_o]$	n_o	n_o

Tableau 1.1 – Modes de propagation de l'onde en fonction de sa polarisation et de l'orientation de l'axe optique du milieu biréfringent par rapport au plan d'interface entre le vide et le milieu biréfringent.

1.1.3.3 Lois de Snell-Descartes

Les lois définies par Willebrord Snell et René Descartes au XVII^e siècle nous permettent de décrire le passage de l'onde à travers une interface (ou dioptre) entre deux milieux diélectriques d'indices de réfraction différents. Ce faisant, une fraction de l'intensité lumineuse peut être réfléchi sur le plan d'interface dans le premier milieu tandis que le reste va être transmis à travers le plan d'interface dans le second milieu. Les lois qui décrivent ces phénomènes de réflexion et de réfraction (ou de transmission) découlent de la continuité entre les deux milieux de la projection du vecteur champ électrique sur le plan d'interface. Cette continuité, qui est une conséquence des équations de Maxwell, implique trois lois :

1. Les pulsations des ondes incidentes, réfléchies et transmises sont égales et leurs vecteurs d'onde sont coplanaires et définissent le plan d'incidence, qui est

perpendiculaire au plan d'interface séparant les deux milieux.

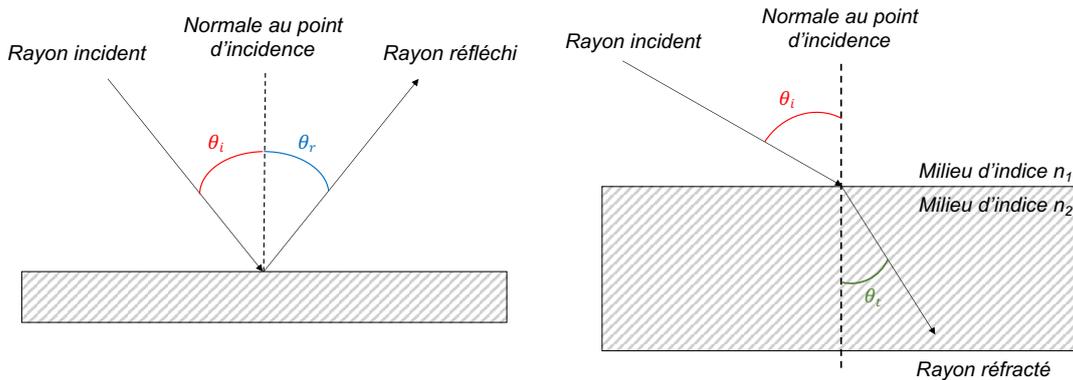
2. L'angle de réflexion θ_r est égal à l'angle d'incidence θ_i (Figure 1.5a).
3. La relation entre l'angle d'incidence θ_i se propageant dans le milieu d'indice n_1 et l'angle de réfraction θ_t de l'onde transmise dans le milieu d'indice de réfraction n_2 (Figure 1.5b) est donnée par :

$$n_1 \sin(\theta_i) = n_2 \sin(\theta_t) \quad (1.18)$$

D'après cette loi, si $n_1 > n_2$, l'angle de réfraction θ_t est inférieur à l'angle d'incidence θ_i . Le rayon réfracté est dit *redressé*. En revanche, si $n_1 < n_2$, il existe un angle limite θ_L pour lequel $\theta_t = \frac{\pi}{2}$. D'après la 3^{eme} loi de Snell-Descartes, on obtient :

$$\theta_L = \arcsin\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \quad (1.19)$$

Si $\theta_i < \theta_L$ alors le rayon peut être transmis et l'angle de réfraction est tel que $\theta_t < \frac{\pi}{2}$. Si $\theta_i > \theta_L$, alors il n'existe pas de rayon réfracté : nous sommes dans le cas d'une réflexion totale. En fait, l'onde réfractée est une onde évanescente dans le second milieu et qui se propage dans le plan d'interface.



- (a) Schéma de la réflexion sur une interface entre deux milieux d'indices de réfraction différents. En rouge, l'angle d'incidence θ_i , et en bleu, l'angle de réflexion θ_r .
- (b) Schéma de la réfraction à travers une interface entre deux milieux d'indices de réfraction différents. En rouge, l'angle d'incidence θ_i , et en vert, l'angle de réfraction θ_t .

FIGURE 1.5 – Illustration de la réflexion (a) et de la réfraction (b) entre deux milieux d'indices de réfraction différents.

Dans la suite de cette étude, nous parlerons de transmission plutôt que de réfraction.

1.1.3.4 Coefficients de Fresnel à travers une interface optique

Les coefficients de réflexion et de transmission du champ EM sont donnés par les *coefficients de Fresnel* correspondant aux rapports des polarisations TE et TM des champs électriques réfléchis et transmis à celles du champ électrique incident :

1 Principe de détection et applications – 1.1 Interaction rayonnement-matière

$$r_{TE, TM} = \frac{E_{r, TE, TM}}{E_{i, TE, TM}} \quad (1.20)$$

$$t_{TE, TM} = \frac{E_{t, TE, TM}}{E_{i, TE, TM}} \quad (1.21)$$

Les équations de Maxwell imposent la continuité entre les deux milieux des projections sur le plan d'interface des champs électriques et magnétiques, entraînant les relations suivantes entre les coefficients de Fresnel pour les polarisations TE et TM du champ EM :

$$r_{TE} + 1 = t_{TE} \quad (1.22) \quad n_i(1 - r_{TM}) = n_j t_{TM} \quad (1.23)$$

Les expressions des coefficients de Fresnel en fonction des indices de réfraction n_i et n_j des milieux i et j (et donc de la longueur d'onde), de l'angle d'incidence θ_i et des polarisations TE et TM de l'onde résultant des équations 1.22 et 1.23 sont répertoriées dans la Table 1.2.

		Réflexion	Transmission
Incidence normale		$r_{ij, TE} = r_{ij, TM} = \frac{n_i - n_j}{n_i + n_j}$	$t_{ij, TE} = t_{ij, TM} = \frac{2n_i}{n_i + n_j}$
Incidence oblique	$\theta_i < \theta_L$	$r_{ij, TE} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_j \cos \theta_j}{n_i \cos \theta_i + n_j \cos \theta_j}$ $r_{ij, TM} = \frac{n_i \cos \theta_j - n_j \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_j + n_j \cos \theta_i}$	$t_{ij, TE} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_j \cos \theta_j}$ $t_{ij, TM} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_j + n_j \cos \theta_i}$
	$\theta_i > \theta_L$	Réflexion totale	

Tableau 1.2 – Expressions des coefficients de réflexion et de transmission de Fresnel entre deux milieux i et j . θ_i et θ_j sont respectivement les angles d'incidence et de transmission. n_i et n_j les indices de réfraction des milieux i et j , respectivement, qui dépendent de la longueur d'onde λ . Notons que si $n_i < n_j$, nous sommes toujours dans le cas $\theta_i < \theta_L$ (pas d'angle limite).

Nous définissons la transmittance T comme le rapport entre les intensités de l'onde transmise et de l'onde incidente, et la réflectance comme le rapport entre les intensités de l'onde réfléchie et de l'onde incidente sur le plan d'interface. En d'autres termes, R et T sont les probabilités de réflexion et de transmission d'un photon par le plan d'interface. Cette interprétation probabiliste implique que $R + T = 1$, ce qui équivaut à dire que l'énergie de l'onde EM est conservée au passage de l'interface. Dans ce manuscrit, la transmittance et la réflectance seront exprimées en pourcentage.

La transmittance et la réflectance, dans le cas d'une interface entre un milieu i et j , sont calculées à partir des coefficients de Fresnel $t = \frac{E_t}{E_i}$ et $r = \frac{E_r}{E_i}$ de la manière suivante :

$$R = |r|^2 \quad (1.24)$$

$$T = \frac{n_t \cos(\theta_j)}{n_i \cos(\theta_i)} |t|^2 \quad (1.25)$$

Dans la suite de ce manuscrit, nous parlerons d'interface simple pour décrire ce cas de figure.

1.1.3.5 Réflectance et transmittance à travers une couche mince

Nous venons de voir les expressions de la transmittance et de la réflectance à travers une interface simple. Ces valeurs sont différentes à travers une couche mince séparant deux milieux.

Une couche, ou une lame, est appelée couche mince si son épaisseur est inférieure à la longueur d'onde des photons qui la traversent. Cette propriété engendre des phénomènes d'interférences qu'il faut alors prendre en compte lors de l'analyse de la transmission et de la réflexion de l'onde EM.

Pour établir les coefficients de transmission et de réflexion à travers une couche mince, commençons par définir la structure étudiée en nous référant à la Figure 1.6. Nous admettrons trois milieux notés 1, 2 et 3. Le milieu 2 représente une couche mince d'épaisseur d entre les milieux 1 et 3, dans laquelle les ondes EM transmises du milieu 1 et réfléchies dans le milieu 2 vont interférer.

Dans cette démonstration, nous étudierons la composante transverse électrique (TE) de la polarisation et nous admettrons que le faisceau de lumière est constituée de plusieurs ondes EM, dont nous étudierons la superposition des ondes transmises et réfléchies hors de la couche mince.

Commençons par étudier le cas d'une incidence normale avec $\theta_1 = 0$. Soit t_l et r_l les coefficients de transmission et de réflexion hors de la couche mince après l allers-retours dans la couche mince, les coefficients de transmission t et de réflexion r correspondant à la superposition de tous les cas de figure sont donnés par :

$$t = \sum_{l=0}^{\infty} (t_l) \quad (1.26)$$

$$r = \sum_{l=0}^{\infty} (r_l) \quad (1.27)$$

Dans la Figure 1.6, t_1 est le coefficient de transmission du champ électrique associé à une onde EM qui traverse la couche mince sans être réfléchi à l'intérieur de la couche mince. En prenant en compte le fait que la phase de l'onde EM doit être égale dans les milieux 1 et 2 au passage des interfaces, et en notant t_{ij} le coefficient transmission de Fresnel du milieu i au milieu j , nous avons donc :

$$\vec{E}_{t1} e^{ik_2 d} = \vec{E}_{t1} e^{ik_3 d} \quad (1.28)$$

$$\vec{E}_0 t_{12} t_{23} e^{ik_2 d} = \vec{E}_{t1} e^{ik_3 d} \quad (1.29)$$

$$\vec{E}_{t1} = \vec{E}_0 t_{12} t_{23} e^{i(k_2 - k_3)d} = \vec{E}_0 t_1 \quad (1.30)$$

1 Principe de détection et applications – 1.1 Interaction rayonnement-matière

avec k_2 et k_3 les vecteurs d'onde dans le milieu 2 et dans le milieu 3, respectivement. Pour une incidence normale nous obtenons donc :

$$t_1 = t_{12} t_{23} e^{i(k_2 - k_3)d} \quad (1.31)$$

Le coefficient de transmission du champ électrique t_2 associé à un photon qui passe des milieux 1 à 2, puis est réfléchi sur l'interface entre les milieux 2 et 3, puis à l'interface entre 2 et 1, et enfin est transmis du milieu 2 au milieu 3 :

$$t_2 = t_{12} r_{23} r_{21} e^{i2k_2 d} t_{23} e^{i(k_2 - k_3)d} = r_{23} r_{21} e^{i2k_2 d} t_1 \quad (1.32)$$

où $2k_2 d$ est le déphasage engendré par l'aller-retour de l'onde EM dans le milieu 2.

Et ainsi de suite jusqu'à subir une infinité d'allers-retours dans la couche mince. Le coefficient de transmission t d'une onde plane homogène hors de la couche mince est donné par la somme des coefficients de transmission qui vont interférer les uns avec les autres, constituant ainsi une progression géométrique de raison $q = r_{23} r_{21} e^{i2k_2 d}$. Cette progression géométrique converge vers :

$$t = \sum_{l=0}^{\infty} (t_l) = \frac{t_1}{1 - q} = \frac{t_{12} t_{23} e^{i(k_2 - k_3)d}}{1 - r_{23} r_{21} e^{i2k_2 d}} = \frac{t_{12} t_{23} e^{i(k_2 - k_3)d}}{1 + r_{23} r_{12} e^{i2k_2 d}} \quad (1.33)$$

Pour un angle d'incidence θ_2 entre les milieux 2 et 3, avec $\beta = k_2 d \cos \theta_2$, $k_2 = n_2 \frac{2\pi}{\lambda_0}$ (dans le cas d'une incidence normale, $\cos \theta_2 = 1$), le coefficient de transmission hors de la couche mince est donné par :

$$t = \frac{t_{12} t_{23} e^{i\beta}}{1 + r_{12} r_{23} e^{2i\beta}} e^{-ik_3 d \cos \theta_3} \quad (1.34)$$

et le coefficient de réflexion par la couche mince r est donné par :

$$r = \frac{r_{12} + r_{23} e^{i2\beta}}{1 + r_{23} r_{12} e^{i2\beta}} \quad (1.35)$$

Intéressons nous maintenant au cas de $\theta_1 \geq \theta_L$. Dans le cas d'une interface simple entre deux milieux 1 et 2, nous sommes en présence d'une réflexion totale avec une réflectance de 100 % et une transmittance nulle. θ_2 n'a pas d'existence physique. Les coefficients de réflexion et de transmission de Fresnel doivent alors être exprimés en remplaçant $n_2 \cos \theta_2$ par $i\gamma$, avec $\gamma = \sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta_1 - n_2^2}$ [BORN, WOLF, BHATIA et al. 1999]. Les formules des coefficients de Fresnel $r_{12,TE,TM}$ et $t_{12,TE,TM}$ obtenues dans ce cas sont données par :

$$r_{12,TE} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - i\gamma}{n_1 \cos \theta_1 + i\gamma} \quad (1.36)$$

$$r_{12,TM} = \frac{n_1 i\gamma - n_2^2 \cos \theta_1}{n_1 i\gamma + n_2^2 \cos \theta_1} \quad (1.37)$$

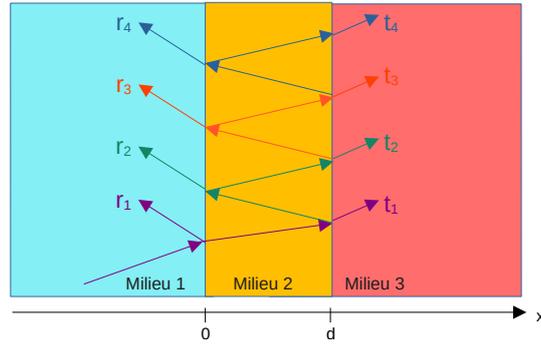


FIGURE 1.6 – Illustration des phénomènes d’interférences au sein d’une couche mince d’épaisseur d (en orange) séparant un milieu 1 (bleu) et un milieu 3 (rouge), pour un angle d’incidence inférieur à l’angle limite.

$$t_{12,TE} = \frac{2n_1 \cos\theta_1}{n_1 \cos\theta_1 + i\gamma} \quad (1.38)$$

$$t_{12,TM} = \frac{2n_1 n_2 \cos\theta_1}{n_1 i\gamma + n_2^2 \cos\theta_1} \quad (1.39)$$

Nous avons bien une réflexion totale avec une réflectance $R_{TE,TM} = |r_{12,TE,TM}|^2 = 1$ dans le cas d’un dioptré simple.

En injectant ces coefficients dans les formules (1.34) et (1.35) nous obtenons le coefficient de transmission et de réflexion à travers une couche mince d’épaisseur d . Dans ce cas, nous avons $\beta = i \frac{k_2}{n_2} d\gamma = \frac{2\pi}{\lambda_0} i\gamma = ik_0 d\gamma$, avec $k_0 = \frac{\omega}{c}$.

1.1.3.6 L’onde evanescente permet la transmission frustrée de l’onde

Dans [VIGOUREUX 2003], J.-M. Vigoureux met en évidence le phénomène de transmission frustrée en utilisant un prisme et une lentille. Prenons un prisme dans lequel nous envoyons de la lumière. Si l’angle d’incidence de la lumière sur l’interface prisme/air est supérieur à l’angle limite entre ces deux milieux, alors nous observons un phénomène de réflexion totale : toute l’intensité lumineuse est réfléchié à l’intérieur du prisme. Cependant, si l’on approche une lentille du prisme suffisamment près du point de réflexion, jusqu’à obtenir une couche mince entre la lentille et le prisme, une partie de l’onde lumineuse va être transmise dans la lentille. C’est ce qu’on appelle la **transmission frustrée** (ou *Frustrated Total Internal Reflection*) (FTIR) et la réflexion totale est dite frustrée.

Ce phénomène est la version optique de l’effet tunnel en mécanique quantique. Dans le cas d’une réflexion totale, on peut observer la présence d’un champ électromagnétique dans le second milieu. Ceci s’explique par le fait qu’une onde plane homogène est définie en tout point de l’espace : si le champ électrique tangentiel au plan d’interface est non nul à la surface du dioptré dans le milieu 1, il ne peut pas l’être à la surface de ce même dioptré dans le milieu 2, sans pour autant pouvoir se propager dans ce milieu. En effet, cette onde observée dans le second milieu ne se propage qu’horizontalement le long du plan d’interface et son amplitude décroît de

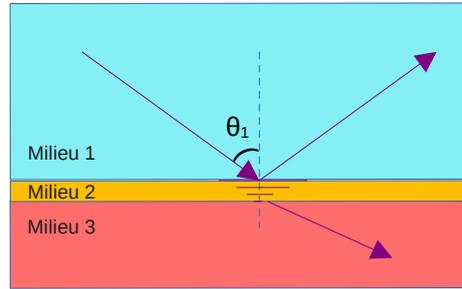


FIGURE 1.7 – Illustration d’une onde évanescente se formant dans le second milieu suite à une réflexion totale sur le plan d’interface entre les milieux 1 et 2. Cette onde évanescente est à l’origine de la transmission frustrée dans le troisième milieu. Dans ce cas, nous avons $n_2 < n_1$, $n_2 < n_3$ et $\theta_1 > \theta_L$.

manière exponentielle en fonction de la profondeur x (normale au plan d’interface). On dit que l’onde est évanescente (Figure 1.7). Elle est exprimée comme suit :

$$\vec{E}_t = \vec{E}_{0t} e^{-\gamma k_0 x} e^{-i(\omega t + n_1 k_0 \sin(\theta_1))} \quad (1.40)$$

Le phénomène de transmission frustrée est d’autant plus important que la longueur d’onde est grande ou que l’épaisseur de la couche mince est fine [BORN, WOLF, BHATIA et al. 1999].

Notons qu’il existe un léger déplacement longitudinal de l’onde qui dépend de l’angle d’incidence et du diamètre du faisceau lumineux. Ce déplacement est de l’ordre du micromètre et sera négligé dans ce travail.

Il est possible de calculer la profondeur d’atténuation δ de l’onde évanescente. Celle-ci correspond à la profondeur pour laquelle l’amplitude de l’onde est divisée par e :

$$\delta = \frac{1}{k_0 \gamma} = \frac{\lambda_0}{2\pi \sqrt{n_1^2 \sin^2 \theta_1 - n_2^2}} \quad (1.41)$$

avec $k_0 = \frac{\omega}{c}$.

Pour $n_1 = 2.3$ et $n_2 = 1.8$, les indices de réfraction du PWO et de l’alumine, à 500 nm, et pour $\theta_1 = 60^\circ$ qui est supérieur à l’angle limite égal à 52° , $\delta = 215$ nm. L’épaisseur de la couche mince doit donc être suffisamment faible devant la profondeur d’atténuation δ de l’onde évanescente pour observer une transmission frustrée.

1.2 Détection des rayons gamma

Les rayonnements EM peuvent être détectés grâce à leur interaction avec le milieu de détection. Les principes de détection des rayons gamma sont détaillés dans cette

section.

1.2.1 Détection indirecte des rayons gamma

La détection des rayons gamma se fait indirectement grâce aux électrons énergisés avec des vitesses relativistes lors de l'interaction des rayons gamma par effet photoélectrique et par diffusion Compton. Ces électrons relativistes vont interagir à leur tour dans le milieu d'interaction en induisant la génération de photons Tcherenkov et de photons de scintillation lorsque le milieu d'interaction est un milieu scintillant.

1.2.1.1 Scintillation et cristaux scintillants

Le phénomène de scintillation intervient lors de l'interaction photoélectrique (Section 1.1.2.1) ou Compton (Section 1.1.2.2) d'un photon avec le cortège électronique d'un atome. L'électron photoélectrique ou l'électron diffusé Compton dépose alors son énergie dans le milieu d'interaction, générant un nombre de photons de scintillations (dans la plage visible-UV du spectre EM) proportionnel à l'énergie déposée. Le comptage des photons de scintillations à l'aide d'un photodétecteur permet alors d'estimer l'énergie déposée dans le milieu scintillant. De plus l'atome ionisé se retrouve dans un état excité instable. Pour se désexciter, l'atome réarrange son cortège électronique en comblant les lacunes des couches internes. Un électron des couches périphériques se déplace vers une couche plus proche du noyau, engendrant une libération d'énergie de deux manières possibles (Figure 1.8) :

1. L'atome relâche un électron Auger présent sur les couches périphériques. L'énergie emportée par l'électron Auger, sous forme d'énergie cinétique (E_{Auger}), est égale à l'énergie du niveau interne (E_i) à laquelle on soustrait l'énergie du niveau externe (E_f) et l'énergie de liaison (E_l) de l'électron sur sa couche périphérique : $E_{Auger} = E_i - E_f - E_l$.
2. L'atome émet un photon de fluorescence dans la gamme d'énergie des rayons X. L'énergie portée par ce rayon X est $h\nu = E_i - E_f$.

Par exemple, un photon de scintillation généré dans un cristal de PWO possède une énergie de l'ordre de l'eV (et donc une longueur d'onde dans le visible). Généralement, l'énergie des électrons Auger et de l'ensemble des rayons X de fluorescence est déposée en même temps que l'énergie de l'électron photoélectrique, de même que celle des photons diffusés Compton s'ils interagissent aussi dans le milieu scintillant, de sorte que le nombre de photons de scintillations émis est proportionnel à l'énergie du rayons gamma incident.

Les cristaux couramment utilisés en tomographie par émission de positrons (TEP) ainsi que le PWO et leurs caractéristiques sont présentés dans la Table 1.3.

La résolution des détecteurs dépend de nombreux facteurs, en particulier des caractéristiques du cristal scintillant. La résolution en temps correspond à la précision de la datation de l'interaction et la résolution en énergie à la précision de la mesure de l'énergie déposée dans le milieu d'interaction.

1 Principe de détection et applications – 1.2 Détection des rayons gamma

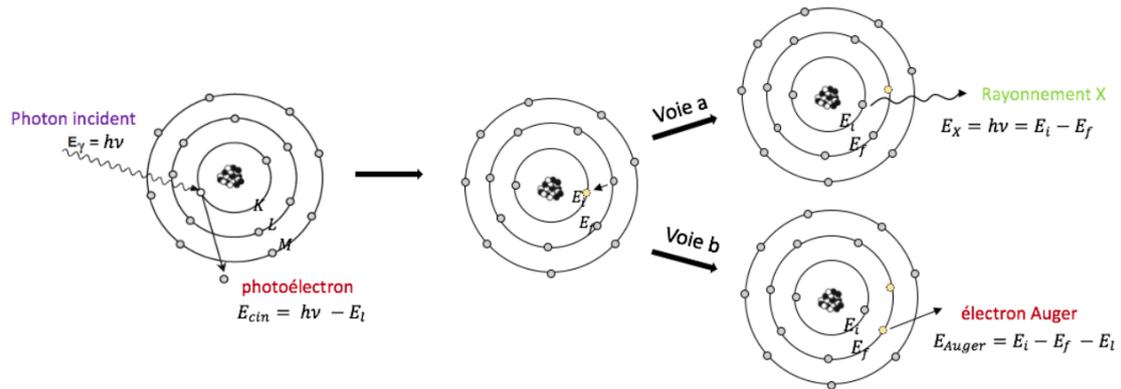


FIGURE 1.8 – Illustration d’une interaction photoélectrique et du réarrangement du cortège électronique par émission d’un rayon X de fluorescence (voie a) ou émission d’un électron Auger (voie b) [Megane FOLLIN 2020].

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	100 - 300	2, 6, 30	420	2.33

Tableau 1.3 – Caractéristiques de quelques scintillateurs [LECOMTE 2009], [P. LECOQ 2006], [WILLIAMS, ROSE, LEE et al. 1996], [JELLISON, BOATNER, RAMEY et al. 2012], [MAO, L. ZHANG et R.-Y. ZHU 2007], [POLYANSKIY 2023]. ρ est la densité du cristal, Z_{eff} son numéro atomique effectif, μ_{PE} le coefficient d’atténuation linéique de l’interaction photoélectrique à 511 keV, LY (*Light Yield*) le rendement de scintillation, τ la constante de déclin moyenne de la scintillation, λ_{max} la longueur d’onde au maximum du pic d’émission lumineuse et n_{max} son indice de réfraction à λ_{max} .

Dans le cas d’un scintillateur, plus le nombre de photons de scintillation détectés est grand, meilleure sera la résolution en énergie. C’est pourquoi on privilégie des détecteurs ayant un rendement de scintillation important (tels que le NaI(Tl), LSO :Ce ou le LaBr₃ :Ce). La résolution en énergie des détecteurs est particulièrement impor-

tante en TEP, car elle permet de rejeter les coïncidences résultant de la détection d'une coïncidence vraie pour laquelle au moins un des photons d'annihilation a interagi par effet Compton dans le champ de vue ou FOV (pour *Field Of View*), et suit donc une trajectoire différente de celle du photon d'annihilation initial.

La résolution temporelle des détecteurs est limitée par le temps de déclin de l'impulsion de scintillation et le rendement de scintillation. Un cristal produisant beaucoup de photons de scintillation avec des constantes de temps de décroissance rapides (de l'ordre de la nanoseconde) tel que le LSO :Ce, le LaBr₃ :Ce, le BaF₂ ou le CsF, présente une bonne résolution temporelle.

Il est également possible d'améliorer la résolution temporelle en utilisant les photons Tcherenkov, qui sont générés pratiquement instantanément, contrairement aux photons de scintillation, qui résultent de la désexcitation radiative d'un atome excité, comme par exemple un ion Ce³⁺ dans le cas du LSO :Ce, ou un ions Tl dans le cas du NaI(Tl).

1.2.1.2 Émission Tcherenkov

L'effet Tcherenkov tient son nom de Pavel Alekseyevich Cherenkov, qui a obtenu le prix Nobel en 1958 pour la découverte de ce phénomène se produisant lorsqu'une particule chargée se déplace dans un milieu à une vitesse v , supérieure à la vitesse de la lumière dans ce milieu égale à $\frac{c}{n}$ où c est la vitesse de la lumière dans le vide et n l'indice de réfraction du milieu, [ČERENKOV 1937].

Dans un milieu diélectrique, des dipôles électriques sont formés au passage de la particule chargée, dont la dépolarisation quasi-instantanée génère des ondes dans la gamme UV-bleue du spectre EM. Si la vitesse de la particule est inférieure à la vitesse de la lumière dans ce milieu, les ondes lumineuses émises forment des interférences destructives. Si sa vitesse est supérieure à la vitesse de la lumière dans ce milieu, les ondes lumineuses forment des interférences constructives, ce qui rend le cône lumineux (Figure 1.9) visible.

L'énergie cinétique minimale nécessaire à l'obtention de l'effet Tcherenkov dépend de l'indice de réfraction n et de la masse m de la particule qui se meut à une vitesse subluminaire dans le milieu :

$$E = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{1}{n^2}}} - 1 \right) \quad (1.42)$$

À 500 nm, le seuil en énergie dans le PWO nécessaire à la génération de photons Tcherenkov est de 58.8 keV. Le nombre de photons émis peut alors être déterminé grâce à la formule de Franck et Tamm [BERTRAND 2015], [JELLEY 1955], qui ont partagé le prix Nobel de physique avec Pavel Cherenkov en 1958. Il dépend de l'énergie de la particule, de sa masse, de sa charge, ainsi que de l'indice de réfraction du milieu. La variation du nombre de photons en fonction de la longueur d'onde varie en $\frac{1}{\lambda^2}$. Les photons de faibles longueurs d'onde sont donc largement plus nombreux (environ

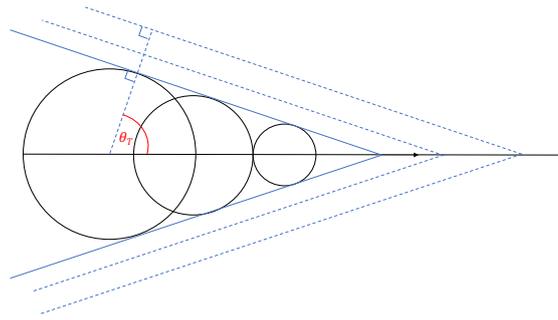


FIGURE 1.9 – Illustration du cône lumineux créé lors de l’effet Tcherenkov. La particule chargée se déplace avec une vitesse supérieure à la vitesse de la lumière dans ce milieu. Chaque point de sa trajectoire est la source d’une onde sphérique. L’ensemble de ces ondes forment un front d’onde qui se déplace à la vitesse de la particule avec un angle d’ouverture dont le cosinus vaut $\frac{c}{nv}$ [Clotilde CANOT 2018].

quatre fois plus de photons de lumière bleue (350 nm) que de photons de lumière rouge (750 nm)). Les photons ultraviolets sont plus représentés, mais invisibles à l’œil nu. Par conséquent, notre œil ne voit qu’une lumière bleue [THECURIUSASTRONOMER 2016]. Enfin, le nombre de photons Tcherenkov est très bas par rapport au nombre de photons de scintillation émis dans un cristal scintillant (environ 200 photons de scintillation pour seulement 20 photons Tcherenkov, pour une énergie de 511 keV déposée dans un cristal de PWO).

L’émission Tcherenkov le long de la trajectoire de la particule chargée induit un front d’onde EM en forme de cône (Figure 1.9), dont la perpendiculaire à la génératrice forme un angle θ_T par rapport à la direction de déplacement, donné par :

$$\cos(\theta_T) = \frac{c}{nv} \quad (1.43)$$

Les photons Tcherenkov sont générés pratiquement instantanément (en moins d’une picoseconde en fonction du matériau) en comparaison des photons de scintillation (en quelques dizaines à quelques centaines nanosecondes en fonction du matériau), ce qui leur donne un grand avantage pour optimiser la résolution temporelle des détecteurs de rayons gamma.

1.2.2 Photodétection de photons Tcherenkov et de scintillation

La détection des photons Tcherenkov et de scintillation peut se faire en utilisant différents photodétecteurs présentés ci-dessous.

Les caractéristiques de chaque photodétecteur présentées ci-après sont résumées dans la Table 1.4.

1.2.2.1 Photodiode (PD) et photodiode à avalanche (APD)

Une diode, est un semi-conducteur, composé d'une jonction P-N (Figure 1.10a), permettant au courant de ne circuler que dans un sens grâce à l'application d'une différence de potentiel. Une photodiode (PD) (Figure 1.10b) utilise le principe des jonctions P-N pour détecter un rayonnement optique et le convertir en signal électrique.

La jonction entre les zones P et N est appelée *zone de déplétion*. Elle est neutre, sans charges libres en mouvement, et d'une épaisseur de l'ordre de la dizaine de microns. Lors du passage d'un photon dans cette zone, une quantité d'énergie peut-être déposée. Si celle-ci est supérieure au gap d'énergie qui sépare la bande de valence de la bande de conduction, alors des paires électron-trou sont créées. Sous l'influence du champ électrique, les électrons libres et les trous se déplacent vers la zone N et la zone P, respectivement. Ce déplacement crée un photocourant proportionnel à l'énergie déposée par la particule incidente.

Dans la photodiode à avalanche (APD), les électrons libres créés par l'ionisation créent à leur tour une avalanche de paire électrons-trous qui participent au photocourant. Les APD, qui fonctionnent dans un régime proportionnel, ont pour avantage de présenter un gain, mais la tension nécessaire est plus élevée que pour une PD. Le gain de multiplication est d'autant plus important que la tension de polarisation est élevée, mais il dépend également de la profondeur à laquelle est créée la paire électron-trou dans la zone déplétée, ce qui engendre une variation de la multiplication ayant pour effet de dégrader la résolution en énergie. Ce gain peut aller jusqu'à 10^3 , ce qui est bien plus faible que pour les tubes photomultiplicateurs (PMT) plus couramment utilisés en photodétection, dont le gain avoisine en général 10^6 .

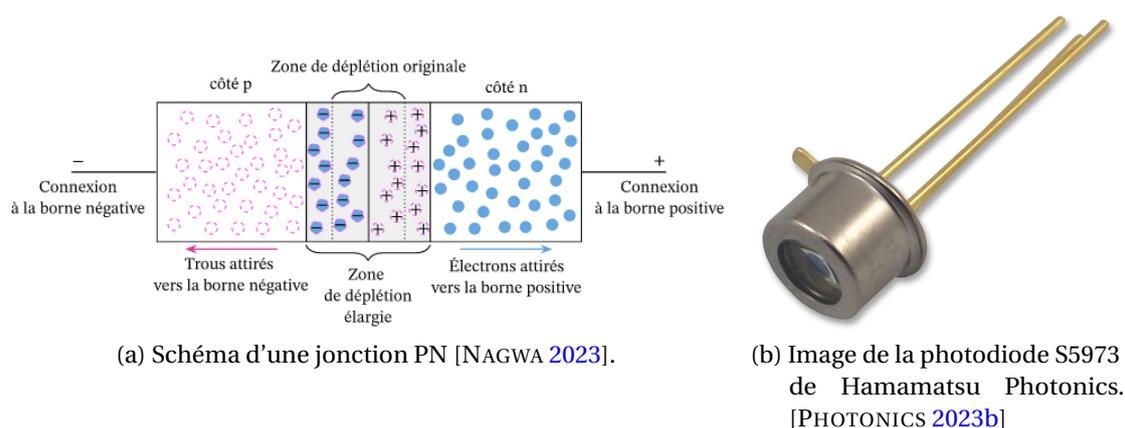


FIGURE 1.10 – Illustration (a) du fonctionnement des photodiodes et (b) photographie d'une photodiode.

1.2.2.2 Photomultiplicateurs en silicium (SiPM)

Les **photo-multiplicateurs en silicium (SiPM)** sont des matrices de plusieurs milliers d'APD de quelques dizaines de microns fonctionnant en mode Geiger (i.e dans un régime disruptif, non-proportionnel) appelées SPAD (pour *Single Photon Avalanche Diode*). Celles-ci sont connectées entre elles, ainsi qu'à un canal de lecture commun permettant de sommer les impulsions générées par chaque SPAD du SiPM. Chaque SPAD fonctionne en mode Geiger, c'est-à-dire que l'on applique une tension supérieure à la tension de claquage permettant d'accélérer suffisamment les électrons pour créer une avalanche disruptive. Le nombre d'électrons mis en mouvement varie très peu avec la variation de la tension de polarisation et l'information sur l'énergie déposée par le photon de lumière est perdue. Cette caractéristique fait des SiPM un détecteur sensible avec une efficacité de détection ou PDE (pour *Photon Detection Efficiency*) plus élevée que pour les PMT [PEYRÉ 2019]. De plus, sa résolution temporelle ou SPTR (pour *Single Photon Time Resolution*) est également bien meilleure que pour les PMT (Table 1.4) [PUILL et IN 2021].

Le domaine spectral des SiPM s'étend de 250 à 1100 nm. La tension nécessaire est relativement faible (inférieure à 100 V). De plus, comme les APD, les SiPM ne font que quelques millimètres d'épaisseur et leur sensibilité aux champs magnétiques est très faible, ce qui en fait des détecteurs peu onéreux, compacts et de bons candidats pour l'imagerie multimodale TEP-IRM. En revanche, le taux de comptage d'obscurité ou DCR (pour *Dark Count Rate*) des SiPM, qui résulte de déclenchements hasardeux des SPAD engendrés par le bruit thermique, est assez élevé, ce qui implique d'utiliser des scintillateurs à haut rendement lumineux.

En couplant des matrices de SiPM à un scintillateur, il est possible d'obtenir une information sur la localisation de l'interaction en analysant le signal provenant de chaque cellule individuellement [MEHADJI 2021].

1.2.2.3 Tubes photomultiplicateurs (PMT)

Le **tube photo-multiplicateur (ou Photo-Multiplier Tubes) (PMT)** (Figure 1.11b) permet également de transformer un ensemble de photons de lumière visible en une impulsion électrique. Comme le montre la Figure 1.11a, les PMT sont des tubes à vide constitués en entrée d'une fine couche photoélectrique, appelée photocathode, dans laquelle les photons de lumière visible interagissent par effet photoélectrique. La capacité de la couche photoélectrique à émettre des photoélectrons résulte à la fois de la probabilité qu'un photoélectron soit arraché à la photocathode par effet photoélectrique et de la probabilité d'extraction de ce photoélectron de la photocathode vers les étages de multiplication du tube à vide, appelés dynodes. On parle alors d'**efficacité quantique (ou Quantum Efficiency) (QE)** de la photocathode. Cette caractéristique dépend fortement de la longueur d'onde et est en général autour de 20 à 30 % [KNOLL 2000]. Ces dynodes sont portés à hautes tensions (quelques centaines à plus de mille volts) croissantes en s'éloignant de la photocathode. Le photoélectron est alors accéléré par le champ électrique créé entre les dynodes. La collision du pho-

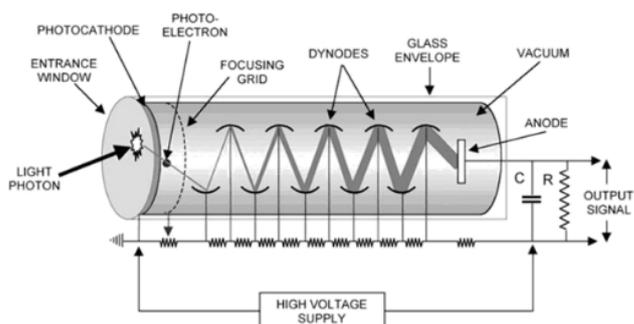
1 Principe de détection et applications – 1.2 Détection des rayons gamma

toélectron primaire avec la première dynode permet d'arracher de nouveaux électrons et ainsi de suite. La multiplication du nombre de dynodes permet la multiplication des photoélectrons par un gain de l'ordre de 10^6 avec un courant d'obscurité assez faible. Les électrons résultant de cette multiplication sont collectés par une anode au bout du tube, afin de former, à l'aide d'un circuit RC, un signal électrique dont l'intégrale est proportionnelle au nombre de photons arrivant sur la photocathode.

Le PMT peut-être caractérisé par sa PDE, qui se calcule comme le produit de l'efficacité quantique de la photocathode (QE) par l'efficacité de collection des photoélectrons ou CE (pour *Collection Efficiency*), c'est-à-dire la probabilité qu'un photoélectron primaire sorte de la photocathode et engendre une avalanche dans un des canaux :

$$PDE = QE \times CE \quad (1.44)$$

La photocathode d'un PMT peut-être composée d'un matériau alcalin ou semi-conducteur (GaAsP, GaAs, InGaAs) de quelques dizaines de nanomètres d'épaisseur. Parmi les photocathodes alcalines, il existe des photocathodes bialcalines (KCsSb pour une absorption maximale dans le bleu, ou RbCsCb pour une absorption maximale dans le vert [MOTTA et SCHÖNERT 2005]) ou multialcalines (S20), c'est-à-dire avec une composition plus complexe formée de plusieurs couches de matériaux.



(a) Schéma du fonctionnement d'un tube photomultiplicateur [CLAWSON 2017].

(b) Image du tube photomultiplicateur R580 de la société Hamamatsu Photonics. [PHOTONICS 2023a].

FIGURE 1.11 – Illustration (a) du fonctionnement du PMT et (b) photographie d'un PMT.

La fenêtre d'entrée du PMT est généralement en saphir (Al_2O_3), en quartz (SiO_2) ou en verre. Dans le cas de l'utilisation d'un scintillateur, celle-ci est généralement couplée optiquement au milieu scintillant par un gel, une graisse ou une colle optique, afin d'augmenter la collection de lumière.

1.2.2.4 Tubes photomultiplicateurs à galettes de microcanaux (MCP-PMT)

Le tube photo-multiplicateur à galette de micro-canaux (ou *Micro-Channel Plate - Photo-Multiplier Tube*) (MCP-PMT) est composé de deux galettes, percées par une

multitude de micro-canaux légèrement obliques, comme le montre la Figure 1.12a. De la même manière que les PMT, les deux galettes sont précédées par une photocathode dans laquelle le photon optique interagit par effet photoélectrique. Le photoélectron généré est ensuite accéléré grâce à un champ électrique et a la possibilité de rentrer dans un des micro-canaux constituant la galette. Le micro-canal étant légèrement oblique, cela favorise l'interaction de l'électron avec les parois internes constituées d'un saphir à forte émission secondaire. De plus, lors de la collision des électrons avec les parois, des ions positifs sont générés. L'obliquité des canaux permet également de bloquer ces ions et ainsi de protéger la photocathode en amont du MCP-PMT. La multiplication du nombre d'électrons le long des canaux des deux galettes, permet d'obtenir un gain de 10^6 avec une résolution temporelle au photon unique ou SPTR (pour *Single Photon Time Resolution*) inférieure à 50 ps FWHM [R. OTA, NAKAJIMA, OGAWA et al. 2021], [PUILL et IN 2021], soit bien meilleure que celle obtenue dans le cas d'un PMT ou des SiPM. Plus précisément, le gain du MCP-PMT est caractérisé par la formule suivante [HAMAMATSU 2007] :

$$G_{MCP} = e^{G\alpha} \quad (1.45)$$

où G est un paramètre caractérisant l'émission secondaire et α est donné par le rapport entre la longueur et le diamètre des micro-canaux.

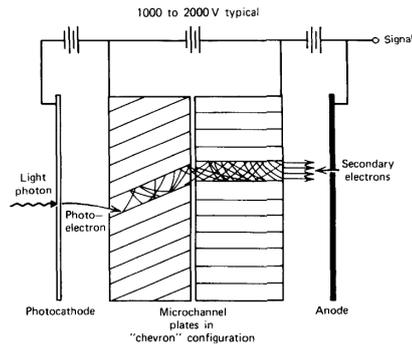
Les MCP-PMT ont malheureusement de nombreux inconvénients, comme par exemple leur coût, leur sensibilité aux champs magnétiques, ou la nécessité de les alimenter avec une haute tension. Un des développements détaillés par Ota *et al.* [R. OTA, NAKAJIMA, OGAWA et al. 2021] a été de construire un MCP-PMT en verre borosilicaté, afin de diminuer d'un facteur 4 la probabilité d'interaction des photoélectrons directement avec les galettes du MCP-PMT et ainsi d'améliorer la résolution spatiale et temporelle.

Tout comme le PMT, le MCP-PMT peut être caractérisé par sa PDE. Barnyakov *et al.* [A. BARNYAKOV, M. BARNYAKOV, CYGANKOV et al. 2017] rapporte la méthode de calcul de la CE pour des MCP-PMT produits par la société Ekran FEP à Novosibirsk. Pour les 64 MCP-PMT étudiés, la CE moyenne mesurée se monte à 58% avec un écart quadratique moyen de 6%.

Grâce à leur haute résolution en temps les MCP-PMT sont utilisés pour la détection de photons Tcherenkov, souvent peu nombreux, mais pratiquement instantanés. Ils sont déjà couramment utilisés dans les expériences de physique des particules comme par exemple le détecteur TORCH (pour *Time Of internally Reflected CHerenkov light*) de l'expérience du LHCb au CERN [CHARLES et FORTY 2011]. La bonne résolution temporelle offerte par les photons Tcherenkov est conservée grâce à l'utilisation des MCP-PMT. Mégane Follin a également étudié la résolution temporelle du MCP-PMT Planacon de Photonis [M. FOLLIN, CHYZH, C-H. SUNG et al. 2022].

La Figure 1.12b montre une photographie d'un MCP-PMT de l'entreprise Photonis.

1 Principe de détection et applications – 1.2 Détection des rayons gamma



(a) Schéma du fonctionnement d'un MCP-PMT [KNOLL 2000].



(b) Image d'un MCP-PMT de l'entreprise Photonis [PHOTONIS 2023].

FIGURE 1.12 – Illustration (a) du fonctionnement du MCP-PMT et (b) photographie d'un MCP-PMT.

Photo-détecteurs	APD	SiPM	PMT	MCP-PMT
Gain	10^2	$10^5 - 10^6$	$10^5 - 10^7$	10^6
τ (ns)	2 - 3	≈ 1	< 1	0.3
SPTR / TTS (ns FWHM)	> 1	0.1	< 0.6	< 0.05
DCR	1 - 10 nA/mm ²	0.1 - 1 MHz/mm ³	< 0.1 nA/cm ²	< 2 cps
PDE / QE à 420 nm (%)	60 - 80	< 40	25	20
Tension (V)	100 - 1.5 k	50	1 k - 2 k	≈ 1 k
Sensibilité magnétique	Faible	Faible	Forte	Forte

Tableau 1.4 – Résumé des caractéristiques des photodétecteurs [Megane FOLLIN 2020], [Chi-Hsun SUNG 2022], [PUILL et IN 2021]. τ est le temps de montée du signal. SPTR (*Single Photon Time Resolution*) et TTS (*Transit Time Spread*) sont la résolution temporelle au photon unique des APD et des SiPM et l'étalement du temps de transit des électrons dans les PMT et les MCP-PMT, qui conditionnent la résolution temporelle du photodétecteur. DCR (*Dark Count Rate*) est le taux de comptage d'obscurité et PDE (*Photon Detection Efficiency*) et QE (*Quantum Efficiency*) sont l'efficacité de détection au photon unique des APD et des SiPM et l'efficacité quantique des photocathodes des PMT et des MCP-PMT.

1.2.3 Résolutions associées aux détecteurs de rayons gamma

Un détecteur de rayons gamma est caractérisé par sa sensibilité, sa résolution en énergie généralement exprimée en pourcents en terme de **largeur à mi-hauteur (ou Full Width at Half Maximum) (FWHM)** rapportée à l'énergie, sa résolution temporelle et sa résolution spatiale (si c'est un détecteur sensible à la position). La résolution spatiale du détecteur est définie comme la plus petite distance permettant de séparer deux points d'interaction. Plus ces résolutions sont petites et plus la sensibilité est grande, meilleures sont les performances du détecteur pour des applications d'imagerie.

La sensibilité d'un détecteur à scintillation dépend de la densité et du numéro atomique effectif du scintillateur, sa résolution en énergie de son rendement de scintillation, tout comme sa résolution temporelle, qui dépend également de la rapidité de l'impulsion de lumière scintillante. Ces performances sont affectées en aval de la génération de lumière par l'efficacité de collection lumineuse qui dépend entre autres du couplage entre le scintillateur et le photodétecteur, de l'efficacité quantique du photodétecteur, de sa variance de multiplication et de sa résolution temporelle. Elles sont de plus impactées par le bruit électronique de la chaîne de lecture.

1.3 Applications de la détection en coïncidence hautement résolue en temps

Dans cette section, nous présentons différentes modalités d'imagerie, telles que la tomographie par émission de positrons (TEP) ou PET (pour *Positron Emission Tomography*), la TEP à temps de vol ou TOF-PET (pour *Time Of Flight PET*), l'imagerie Compton, l'imagerie temporelle des gamma prompts ou PGTI (pour *Prompt Gamma time Imaging*) et la télédétection laser ou LIDAR (pour *Laser Imaging Detection And Ranging*).

1.3.1 Tomographie par émission de positrons (TEP)

La **tomographie par émission de positrons (TEP)** est une modalité d'imagerie utilisée en médecine nucléaire qui permet d'obtenir une image fonctionnelle du corps du patient (Figure 1.13a). Elle consiste en l'injection par voie intraveineuse d'un radiopharmaceutique, qui est composé d'une molécule (par exemple un sucre comme le désoxyglucose (DG) pour l'imagerie des tumeurs cancéreuses, ou du sodium (Na) pour l'imagerie osseuse) marquée par un isotope radioactif émetteur de positrons (le ^{18}F pour les deux exemples ci-dessus). Le radiopharmaceutique est aussi appelé *traceur* ou *marqueur*. Une fois injecté, le traceur se fixe dans le corps du patient selon le métabolisme associé à la molécule du traceur. Les isotopes radioactifs utilisés en TEP ont généralement une demi-vie courte, de l'ordre de quelques minutes à plusieurs heures (2 minutes pour ^{15}O , 20 minutes pour ^{11}C , 2 heures pour ^{18}F), ce qui a pour effet de limiter d'autant la dose absorbée par le patient pour une activité donnée.

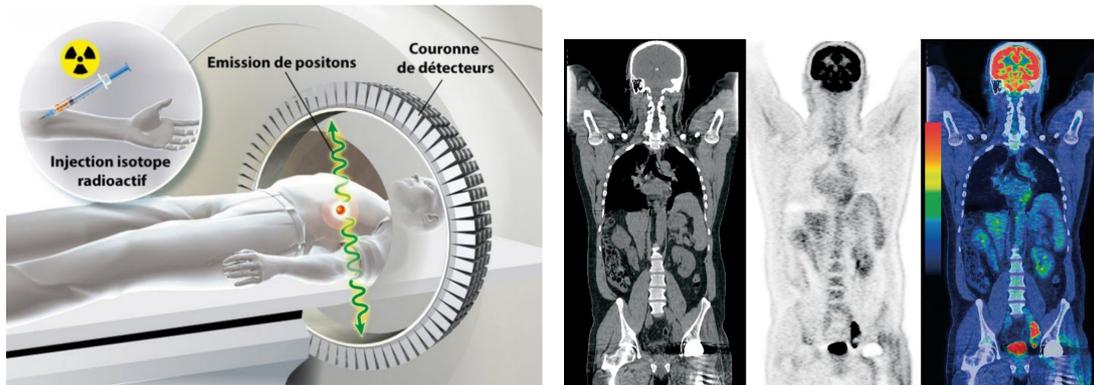
1 Principe de détection et applications – 1.3 Applications de la détection en coïncidence hautement résolue en temps

Lors de sa désintégration, le radioélément émet un rayon β^+ , c'est-à-dire un positron relativiste qui va parcourir une courte distance, de l'ordre du millimètre (0.5 mm dans le cas du ^{18}F [DREUILLE, MASZELIN, FOEHRENBACH et al. 2004]), avant de s'annihiler avec un électron atomique du corps du patient. Celle-ci se fait pratiquement au repos par rapport au patient, et la masse de l'électron et du positron est entièrement convertie en énergie EM sous forme de deux photons de 511 keV émis à 180° l'un de l'autre. Des détecteurs disposés en couronne autour du patient détectent les paires de photons d'annihilation en coïncidence, c'est-à-dire pour une différence de temps de détection entre les photons inférieure à une durée fixe appelée fenêtre de coïncidence.

Les détecteurs utilisés habituellement sont des scintillateurs avec :

- un numéro atomique effectif élevé pour favoriser l'absorption photoélectrique du photon d'annihilation,
- un rendement de scintillation élevé pour favoriser la résolution en énergie,
- des constantes de déclin de l'impulsion de scintillation petites et un rendement de scintillation élevé pour assurer une bonne résolution temporelle.

Une paire de détecteurs utilisés en coïncidence permet de définir une ligne de réponse, ou LOR (pour *Line Of Response*) tracée entre les centres des faces avant des détecteurs impliqués dans la coïncidence. L'accumulation d'une multitude de coïncidences détectées entre des photons d'annihilation par une paire de détecteurs permet d'estimer l'intégrale de la distribution des points d'annihilation le long de la LOR. Ces intégrales de lignes permettent de constituer des projections de la distribution volumique du traceur. Une inversion tomographique de l'ensemble des projections par une méthode analytique ou itérative permet alors de reconstruire la distribution de concentration du traceur qui, par exemple, s'est fixé dans une tumeur cancéreuse. Cette zone apparaît donc plus active sur l'image reconstruite, comme le montre la Figure 1.13b obtenue par un marquage au fluorodésoxyglucose (^{18}F)-FDG où, par ailleurs, le cerveau apparaît également plus actif en raison de sa consommation importante de sucre, de même que la vessie et les reins qui permettent l'élimination du radiopharmaceutique. La TEP est utilisée en parallèle d'une tomographie par rayons X permettant d'obtenir une image anatomique afin de localiser les zones fonctionnellement actives dans le corps du patient. On parle alors de scan TEP/CT (Figure 1.13b).



(a) Illustration d'un examen TEP. Le radiopharmaceutique est injecté au patient, se fixe sur la zone d'intérêt et émet un positron qui s'annihile avec un électron du milieu pour donner lieu à deux gamma de 511 keV émis à 180° l'un de l'autre et détectés en coïncidence par la couronne de détecteurs autour du patient [ELSAN 2023].

(b) A gauche, imagerie anatomique obtenue à partir d'un scanner. Au centre, imagerie fonctionnelle obtenue par un examen TEP. A droite, fusion des deux images précédentes permettant de localiser les zones lésées dans le corps du patient [IMAGEM 2023].

FIGURE 1.13 – Illustration de (a) l'examen TEP et (b) une imagerie obtenue par TEP/CT.

1.3.1.1 Résolution spatiale et temporelle d'une caméra TEP

En TEP, le choix des composants du détecteur est primordial pour optimiser la résolution spatiale. Elle est dégradée par de multiples facteurs, dont l'incertitude sur le parcours du positron suite à la désintégration du radiopharmaceutique, ou bien la non-colinéarité des photons d'annihilation (Figure 1.14). En effet, ces derniers sont émis exactement à 180° l'un de l'autre dans le référentiel de la paire électron-positron, mais qui n'est pas parfaitement au repos dans le référentiel de la caméra en raison de l'agitation thermique. Vu de la caméra TEP, la distribution de l'acolinéarité entre la paire de photons d'annihilation a une largeur à mi-hauteur d'environ 0.5° dans l'eau [COLOMBINO, FISCELLA et TROSSI 1965].

Parmi les phénomènes qui dégradent la résolution spatiale, l'incertitude sur la profondeur d'interaction du photon d'annihilation dans le détecteur entraîne une erreur de *parallaxe* sur la position de la LOR. Celle-ci, peut-être minimisée en mesurant la *profondeur d'interaction* (ou *Depth Of Interaction*) (DOI), par exemple en instrumentant plusieurs faces du milieu d'interaction avec des photodétecteurs, en segmentant le détecteur en profondeur ou en texturant sa surface de manière appropriée.

En additionnant quadratiquement les sources d'erreurs, Steve Derenzo et Bill Moses ont modélisé la résolution spatiale intrinsèque au centre d'une caméra TEP [MOSES 2011]. Pour un anneau de détecteurs de diamètre D , la résolution spatiale au centre

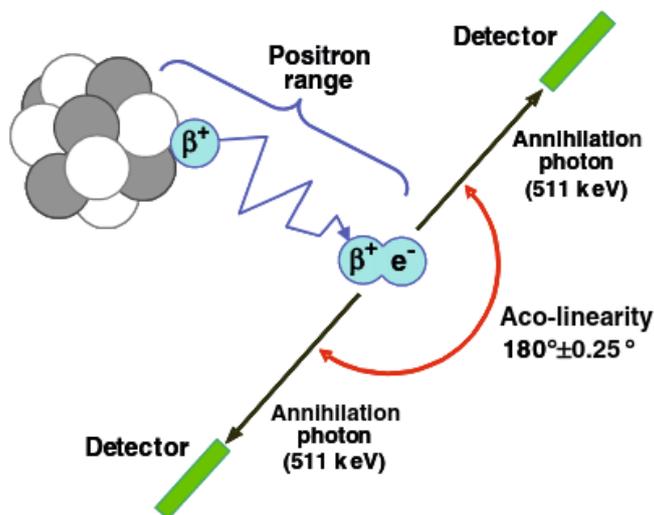


FIGURE 1.14 – Illustration des deux facteurs physiques limitant la résolution spatiale : la distance parcourue par le positron dans le corps du patient avant annihilation, et la non-colinéarité des deux photons d’annihilation. [LECOMTE 2009].

de l’anneau peut alors être estimée de la manière suivante :

$$\Gamma = 1.25 \sqrt{\left(\frac{l_{cristal}}{2}\right)^2 + d_{positron}^2 + (0.0022D)^2} \quad (1.46)$$

où $l_{cristal}$ est la largeur du détecteur et $d_{positron}$ le parcours moyen du positron avant son annihilation. La valeur $0.0022 \times D = (0.5^\circ \left(\frac{\pi}{2 \times 180}\right) \times \frac{D}{2})$ résulte de l’acolinéarité de la paire de photons d’annihilation [LECOMTE 2009].

Cliniquement, la résolution spatiale des caméras TEP cliniques à l’état de l’art actuelles se situe entre 3 et 5 mm FWHM.

La résolution temporelle est particulièrement importante pour réduire le taux de détection de coïncidences fortuites qui dégradent la qualité de l’image. La **résolution temporelle de la coïncidence** (ou *Coincidence Time Resolution*) (CTR) est donnée par :

$$CTR = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} \quad (1.47)$$

où σ_1 et σ_2 sont les résolutions temporelles de chacun des détecteurs. Si on note $\Delta t = t_2 - t_1$ la différence entre les temps de détection des photons d’annihilation par chacun des détecteurs impliqués dans la coïncidence, et si on établit l’histogramme de cette différence de temps aussi appelée temps-de-vol ou TOF (pour *Time Of Flight*), on obtient une distribution gaussienne dont la largeur à mi-hauteur permet d’estimer la CTR. Néanmoins, pour un cristal épais, l’histogramme du temps-de-vol reproduit le plus souvent une laplacienne qui résulte de la convolution de deux densités de probabilités exponentielles décrivant la profondeur d’interaction dans le cristal. Similaire-

ment, lorsque le cristal a un faible rendement de scintillation, la courbe temps-de-vol suit également une laplacienne résultant de la distribution exponentielle du temps d'émission des photons de scintillation.

Xie *et al.* [XIE, X. ZHANG, Y. ZHANG et al. 2020] ont mesuré la CTR de 28 paires de scintillateurs couplés à des matrices SiPM. La meilleure CTR qu'ils ont obtenue est de 74 ps FWHM pour une paire de cristaux de 6 mm de CeBr₃:Ce. Ils ont également relevé que la résolution temporelle est meilleure pour des cristaux avec des surfaces non polies. Actuellement, la caméra clinique à l'état de l'art avec la meilleure CTR est la caméra Biograph Vision du Siemens, qui est construite à partir de cristaux de LSO couplés à des SiPM et offre une CTR de 215 ps FWHM [SLUIS, JONG, SCHAAR et al. 2019].

1.3.1.2 TEP à temps de vol (TOF-PET)

La TEP à temps de vol ou TOF-PET (pour *Time Of Flight-PET*) prend en compte la mesure temps de vol. Ainsi, sachant que les rayons gamma se propagent à la vitesse de la lumière, il est possible de localiser le point d'annihilation le long de la LOR avec une précision proportionnelle à la CTR (Figure 1.15).

$$\Delta t = TOF \pm CTR \quad (1.48)$$

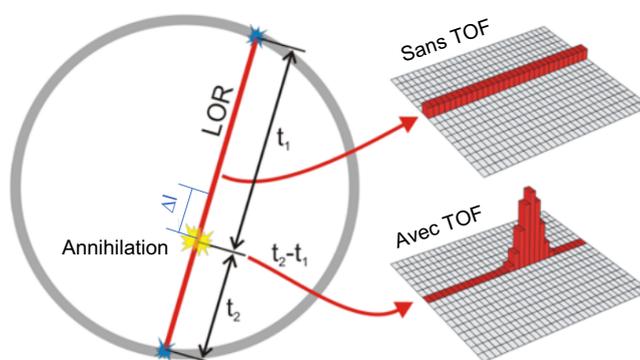


FIGURE 1.15 – Schéma du principe de la TEP à temps-de-vol permettant de localiser le point d'annihilation le long de la LOR. Sans l'utilisation du temps-de-vol (histogramme *Sans TOF*), l'information résultant de la détection d'une coïncidence sur une LOR est distribuée uniformément à tous les pixels de la LOR. Grâce à la mesure du temps de vol donné par $t_2 - t_1$, (histogramme *Avec TOF*), il est possible de localiser le point d'annihilation sur la LOR à une distance Δl du centre de la LOR et avec une distribution de largeur à mi-hauteur proportionnelle à la CTR.

La distance entre le centre de la LOR et la localisation de l'annihilation est donnée par :

1 Principe de détection et applications – 1.3 Applications de la détection en coïncidence hautement résolue en temps

$$\Delta l = c \times \frac{TOF}{2} \quad (1.49)$$

et l'incertitude sur Δl par :

$$c \times \frac{CTR}{2} \quad (1.50)$$

avec $c = 30 \text{ cm ns}^{-1}$ la vitesse de la lumière dans le vide.

Par exemple, le prototype Biograph Vision de Siemens, qui offre une CTR de 215 ps FWHM, permet de localiser le point d'annihilation avec une incertitude de 3.2 cm FWHM.

Pour une même dose administrée au patient et une même durée d'examen, la TEP à temps-de-vol permet d'améliorer le **rapport signal sur bruit (ou *Signal to Noise Ratio*) (SNR)** de l'image par rapport à un TEP sans temps-de-vol d'un facteur donné par :

$$G_{SNR} \approx \sqrt{\frac{2 \times L}{c \times CTR}} \quad (1.51)$$

avec L la largeur du champ de vue ou FOV. Ainsi, pour $L = 40 \text{ cm}$, un gain du SNR de 3.5 est attendu pour une CTR de 215 ps FWHM [LECOMTE 2009].

De plus, pour une même qualité d'image, il est possible de diminuer soit la durée d'examen soit la dose administrée au patient, c'est-à-dire la quantité d'activité injectée, ce qui contribue soit au confort du patient avec une durée d'examen réduite, soit à la possibilité de prendre en charge des personnes plus radiosensibles comme les enfants ou de procéder à un suivi plus régulier de l'évolution tumorale.

Les premières caméras de TEP à temps-de-vol sont apparues dans les années 80. Constituées de cristaux de fluorure de césium (CsF) ou de fluorure de baryum (BaF_2), elles permettaient d'obtenir une CTR de 500 ps FWHM et fournissaient la preuve que le bruit statistique pouvait être nettement amélioré par rapport à la TEP conventionnelle [TER-POGOSSIAN, FICKE, YAMAMOTO et al. 1982]. Néanmoins, la faible densité et le rendement lumineux modeste des cristaux utilisés ne permettaient pas une bonne efficacité de détection, ce qui limitait la qualité des images en raison de la faiblesse des statistiques acquises lors d'un examen. De plus l'électronique de mesure n'était pas aussi performante qu'aujourd'hui. Les cristaux de germanate de bismuth (BGO), présentent l'avantage d'une densité élevée mais avec une durée de l'impulsion de scintillation importante. Contrairement au BGO, des scintillateurs plus rapides comme le bromure de lanthane ($\text{LaBr}_3 : \text{Ce}$) permettent d'obtenir une CTR d'environ 320 ps FWHM [KUHN, SURTI, KARP et al. 2006]. Les cristaux les plus utilisés sont aujourd'hui des cristaux d'oxyorthosilicate de lutécium ($\text{LSO} : \text{Ce}$) [MOSZYNSKI, KAPUSTA, NASSALSKI et al. 2006] ou d'oxyorthosilicate de lutécium-yttrium ($\text{LYSO} : \text{Ce}$) dopés au cérium, qui possèdent un rendement de scintillation très important et des constantes de déclin rapides (30-40 ns au lieu de 300 ns pour le BGO).

1.3.1.3 Imagerie directe par émission de positons (dPEI)

Comme nous venons de le voir, à statistique équivalente, la TEP à temps-de-vol permet d'améliorer la qualité de l'image en comparaison de la TEP sans temps-de-vol. Dans les deux cas, une reconstruction tomographique est nécessaire pour obtenir l'image.

D'après l'Eq 1.49, une CTR de 10 ps FWHM permettrait d'obtenir une résolution de 1.5 mm FWHM, soit sensiblement supérieure à l'état de l'art des scanners actuels (3 à 5 mm FWHM). Une imagerie directe par émission de positrons ou dPEI (pour *direct Positron Emission Imaging*) [KWON, Ryosuke OTA, BERG et al. 2021], c'est-à-dire sans inversion tomographique, serait alors possible. Une telle CTR permettrait alors de minimiser la quantité de coïncidence détectées pour obtenir une qualité d'image équivalente tout en réduisant le temps de traitement des données.

Dans ce but, Paul Lecoq *et al.* [Paul LECOQ, MOREL et PRIOR 2020] ont proposé de lancer un défi dont l'objectif serait d'obtenir une CTR inférieure à 10 ps FWHM permettant d'ouvrir la voie à l'imagerie directe par émission de positrons.

1.3.2 Imagerie Compton

Une camera Compton permet d'imager des sources de rayons gamma en exploitant l'effet Compton (Section 1.3b). Elle est généralement composée d'un *diffuseur*, dans lequel se produit l'interaction Compton, et d'un *absorbeur*, dans lequel le photon diffusé est absorbé. Les positions de ces deux interactions nous donnent l'axe d'un cône d'incidences possibles, dont le sommet correspond à la localisation de l'interaction Compton dans le diffuseur et l'angle d'ouverture α est donné par l'équation :

$$\alpha = \arccos\left(1 - \frac{E_1}{E_1 + E_2} \times \frac{m_e c^2}{E_2}\right) \quad (1.52)$$

où E_1 et E_2 sont les énergies déposées dans le diffuseur et dans l'absorbeur, respectivement, et $m_e c^2$ est l'énergie de masse au repos de l'électron.

En multipliant le nombre d'événements Compton, c'est-à-dire de cônes d'incidences possibles, on détermine une position probable du lieu d'émission des photons [TODD, NIGHTINGALE et EVERETT 1974], [MEHADJI 2021]. Une haute résolution temporelle permet de rejeter les événements rétrodiffusés après une interaction Compton dans l'absorbeur qui sinon sont faussement interprétés comme des diffusions Compton vers l'avant ayant eu lieu dans le diffuseur.

1.3.3 Imagerie temporelle des gamma prompts (PGTI)

Les rayons gamma prompts ou PG (pour *Prompt Gamma*) sont des photons de 1 à 8 MeV produits suite à une collision inélastique avec un ion incident [KRIMMER, D. DAUVERGNE, LÉTANG et al. 2018]. En raison de leur grande énergie, les PG sont faiblement atténués. De plus, ils sont émis quasi-instantanément lors de la collision. Ces deux caractéristiques favorisent une bonne résolution spatio-temporelle. Leur

utilisation dans le cadre de l'imagerie médicale est néanmoins limitée en raison de la présence de neutrons secondaires pouvant également être générés lors de la collision, et de leur très faible quantité (environ 0.05 PG pour un proton parcourant 10 cm) [Sebastien CURTONI 2020].

Plusieurs approches sont proposées pour imager les vertex d'émission des PG [Denis DAUVERGNE, ALLEGRI, CAPLAN et al. 2020], dont l'imagerie temporelle des gamma prompts ou PGTI (pour *Prompt Gamma Timing Imaging*), qui consiste en la reconstruction de la distribution des vertex d'émission des PG grâce à la mesure du temps de vol du proton à partir de son passage dans un moniteur de faisceau en diamant [Sebastien CURTONI 2020] et du gamma-prompt jusqu'à sa détection [JACQUET, MARCATILI, GALLIN-MARTEL et al. 2021]).

1.3.4 LIDAR

L'imagerie médicale n'est pas la seule à pouvoir bénéficier d'une imagerie hautement résolue en temps pour la détection des rayonnements EM. La technologie du LIDAR (pour *Laser Imaging Detection And Ranging*) utilise les lasers pour cartographier l'environnement. Cette télédétection fonctionne comme un radar utilisant des ondes radio ou un sonar utilisant des ultrasons, mais avec des lasers infrarouges, visibles ou ultraviolets, qui ont une portée bien plus importantes. Elle mesure la distance d'un objet grâce aux temps-de-vol de la lumière, connaissant la vitesse de la lumière et le temps mesuré entre l'émission et la réception de l'impulsion qui a été réfléchi par l'obstacle.

Les LIDAR trouvent des applications pour la sécurité routière, les systèmes de conduite automatique de véhicules, ou encore la surveillance de l'environnement. La haute résolution temporelle des LIDAR permet d'atteindre une précision sur la mesure de l'ordre du mm ou du cm, selon leur domaine d'utilisation, même pour des objets fins ou à grande distance.

1.4 Le projet ClearMind

Le projet ClearMind [YVON, SHARYY, M. FOLLIN et al. 2020] a pour but de développer un détecteur sensible à la position avec une résolution spatiale de l'ordre de 4 mm^3 FWHM et une résolution temporelle de 100 ps FWHM, pour l'imagerie ultra-rapide des rayons gamma. La Figure 1.16 illustre le principe du détecteur présenté dans cette section. Le module de détection ClearMind est constitué d'un cristal de tungstate de plomb (PWO), dit *scintronique*, c'est-à-dire qui allie scintillation et génération de photoélectrons grâce à une couche photoélectrique déposée directement sur la face interne du cristal utilisé comme fenêtre d'entrée d'un MCP-PMT. L'indice de réfraction de la photocathode étant plus grand que l'indice de réfraction du cristal, la réflexion totale au delà de l'angle limite engendrée habituellement par la présence d'un gel optique pour coupler le cristal au photodétecteur est supprimée (l'indice de réfraction du gel optique proche de 1.5 est en général inférieur à celui des cristaux de

scintillation couramment utilisés). Ainsi, l'optimisation de la transmission des photons entre le cristal et la couche photoélectrique, et la prise en compte des photons de scintillation et des photons Tcherenkov générés dans le PWO permettent d'améliorer la résolution temporelle du module de détection. L'utilisation des photons Tcherenkov pour l'imagerie ultra-rapide appliquée à la TEP à temps-de-vol a préalablement été étudiée par Canot *et al.* [C. CANOT, ALOKHINA, ABBON *et al.* 2017] dans le cadre de l'expérience PECHE du groupe CaLIPSO [YVON, RENAULT, TAUZIN *et al.* 2014]. Dans leur article, les auteurs analysent la pertinence d'une paire de détecteurs YAP/PbF₂, couplés par un gel optique à un MCP-PMT Planacon de Photonis [PHOTONIS 2022]. L'efficacité de détection obtenue était de 30 % et la résolution temporelle de 180 ps FWHM. L'amélioration de ces performances a motivé le projet ClearMind pour lequel le cristal *scintronique* est encapsulé dans un MCP-PMT et lui sert de fenêtre d'entrée.

Le nuage d'électrons générés par le MCP-PMT est collecté par des [lignes de transmission \(ou Transmission Lines\) \(TL\)](#) lues à leurs deux extrémités. Leur pas détermine la résolution spatiale dans la direction perpendiculaire aux TL et une analyse par apprentissage machine ou ML (pour *Machine Learning*) des signaux collectés aux deux extrémités des TL permet d'améliorer la résolution spatiale dans la direction des TL [Chi-Hsun SUNG 2022].

Une modélisation complète du module ClearMind [C.-H. SUNG, CAPPELLUGOLA, M. FOLLIN *et al.* 2023] a été menée avec le logiciel Geant4 en prenant en compte les phénomènes d'interférences et de transmission frustrée au sein de la couche mince [CAPPELLUGOLA, S. CURTONI, DUPONT *et al.* 2021], afin d'appréhender la précision attendue du module de détection ClearMind et d'optimiser ses performances.

Les caractéristiques des matériaux choisis sont décrites dans la suite de cette section.

1.4.0.1 PWO : scintillateur et radiateur Tcherenkov

L'évaporation de la photocathode directement sur le cristal nécessite une température élevée. Ceci implique que le cristal doit être résistant aux hautes températures, ce qui n'est pas le cas du fluorure de plomb (PbF₂) utilisé lors de précédentes expériences : il est fragile et dégaze des composés de plomb lorsqu'il est chauffé. En revanche, le [tungstate de plomb \(PbWO₄\) \(PWO\)](#) possède de bonnes propriétés mécaniques, dégaze peu à haute température et a un bon rendement Tcherenkov (environ 20 photons Tcherenkov par interaction gamma de 511 keV), par rapport au rendement de scintillation (seulement 200 photons par évènement à cette même énergie) [DORENBOS *et VAN EIJK* 1996]. Il a une densité de 8.28 g cm⁻³.

Le PWO est un cristal biréfringent (Section 1.1.3.2). La Figure 1.17a représente les indices de réfraction ordinaires et extraordinaires en fonction de la longueur d'onde choisis comme référence dans la suite de ce travail de thèse. L'indice de réfraction du PWO varie passablement en fonction de la qualité du cristal, de son dopage et sa connaissance est impactée par la précision des mesures (cf. les différents indices de réfraction trouvés dans la littérature Figure 2.8 du Chapitre 2 [HUANG *et SEO* 2007], [BACCARO, L M BARONE, BORGIA *et al.* 1995], [CHIPAUX 1995]).

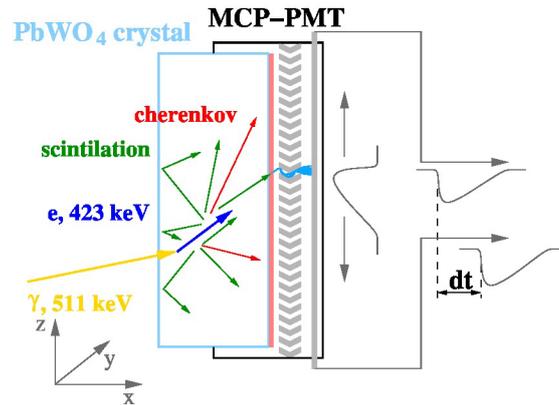
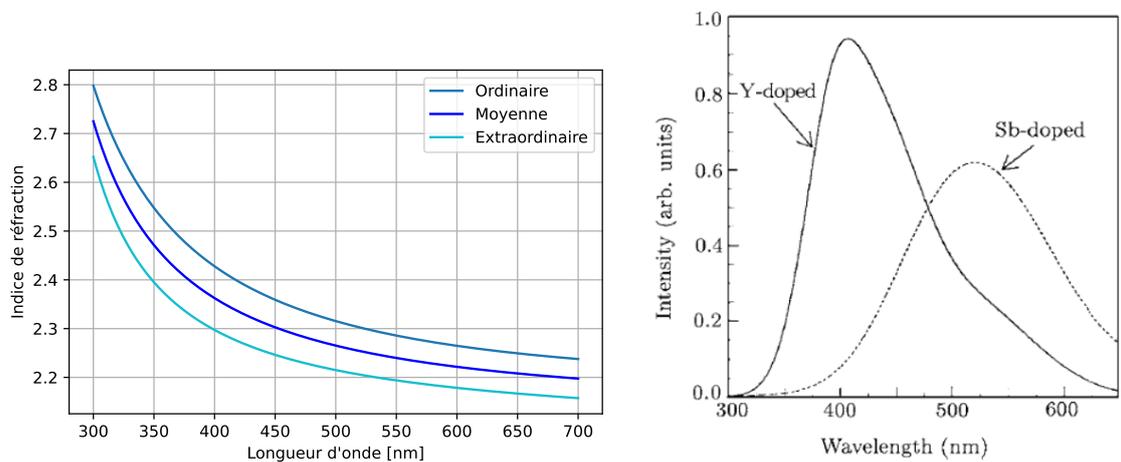


FIGURE 1.16 – Illustration du détecteur ClearMind [YVON, SHARYY, M. FOLLIN et al. 2020]. Le cristal *scintronique* est représenté en bleu, la photocathode, déposée directement sur le cristal, en rouge, et le tout est encapsulé dans un MCP-PMT représenté en gris. L'électron (en bleu foncé) mis en mouvement par l'interaction du photon d'annihilation (en jaune) génère la production de photons de scintillation (en vert) et de photons Tcherenkov (en rouge), à l'origine d'un photoélectron créé dans la photocathode, qui est multiplié dans un micro-canal du MCP-PMT pour créer une impulsion électrique collectée par une ligne de transmission en contact avec le plan d'anode densément pixellisé situé en aval du MCP-PMT.



(a) Indice de réfraction ordinaire, extraordinaire et moyen du tungstate de plomb d'après [HUANG et SEO 2007]. (b) Rendement de scintillation du PWO en fonction de son dopage. [MING, HONG-FANG, CHENG et al. 2001]

FIGURE 1.17 – Indice de réfraction ordinaire et extraordinaire (a) et spectre d'émission scintillante (b) du PWO.

Le PWO est transparent aux longueurs d'onde supérieures à 350 nm [ANNENKOV,

KORZHIK et LECOQ 2002]. Il possède un maximum de scintillation à environ 420 nm (Figure 1.17b) et des constantes de temps de décroissance de l'émission rapides, dont les principales sont 2 et 6 ns, qui dépendent du dopage et de la température ([MING, HONG-FANG, CHENG et al. 2001], [M. FOLLIN, SHARYY, BARD et al. 2021]).

1.4.0.2 Une photocathode déposée directement sur le cristal passivé par une couche mince d'oxyde

Les couches photoélectriques bialcalines et multialcalines sont les références en termes d'efficacité aux longueurs d'onde visibles (350 à 700 nm). Avec un indice de réfraction de la photocathode, de l'ordre de 2.7 dans le visible, qui est supérieur à l'indice de réfraction du PWO d'environ 2.3, cette couche devrait idéalement être directement posée sur le cristal scintillant pour s'affranchir de couplage optique et éviter le phénomène de réflexion totale. Afin de protéger la photocathode (PC) de l'oxydation au contact du cristal de PWO, une passivation de l'interface cristal/PC a pu être réalisée par la société Photek, Ltd. en disposant une fine couche d'oxyde intermédiaire. L'indice de réfraction de cette couche de passivation étant inférieur à celui du cristal, la réflexion totale est à nouveau possible. Cependant, la faible épaisseur de la couche mince, inférieure à la longueur d'onde des photons de scintillation et Tcherenkov, permet une *transmission frustrée* des photons (Section 1.1.3.5), qui améliore sensiblement l'efficacité de collection lumineuse. Un gain sur la probabilité de transmission à la photocathode d'au moins un facteur 4 est attendu par rapport à un détecteur utilisant un gel optique.

L'impact de cette couche de passivation sur la transmission des photons optiques, du cristal vers la photocathode est largement développé dans la suite de ce manuscrit. Cette analyse a également fait l'objet d'une amélioration du modèle optique du logiciel Geant4, qui permet depuis la version 11.1 diffusée en décembre 2022 de simuler le transport optique à travers une interface composée d'une couche mince [CAPPELLUGOLA, S. CURTONI, DUPONT et al. 2021].

1.4.0.3 Un gain optimisé grâce au MCP-PMT et une lecture des signaux optimisée

Le bruit d'obscurité bien trop important des SiPM ne nous permettait pas de conserver l'avantage donné par la détection de photons Tcherenkov. Le photodétecteur avec la meilleure résolution temporelle est actuellement les MCP-PMT. C'est pourquoi ces derniers ont été choisis pour optimiser les caractéristiques du module de détection ClearMind et permettre de valoriser la détection des photons Tcherenkov. Les MCP-PMT utilisés proviennent de la société Photek, Ltd. dont les propriétés sont les suivantes :

- 64×64 anodes de 0.45×0.45 mm² chacune séparées par un pas de 0.828 mm
- Une tension d'alimentation comprise entre 2 et 3 kV
- Une surface active de 53×53 mm²

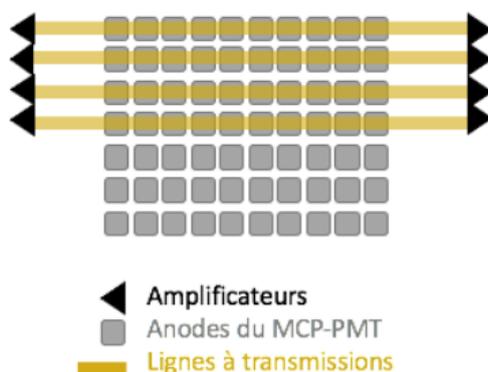


FIGURE 1.18 – Illustration simplifiée du parcours du signal en sortie du MCP-PMT, du plan d’anode aux amplificateurs en passant par les lignes à transmission. Ce schéma est extrait de la thèse de Mégane Follin [Mégane FOLLIN 2020].

- Un étalement du temps de transit ou TTS (pour *Time Transit Spread*) inférieur à 40 ps RMS
- Un temps de montée inférieur à 175 ps
- Un taux de comptage d’obscurité inférieur à 2 Hz par anode

En aval du MCP-PMT, des plans d’anodes densément pixelisés (32×32 pixels, soit 1024 voies), sont lus par 32 TL instrumentées à leurs deux extrémités, qui permettent de collecter la gerbe électronique en sortie des micro-canaux et de reconstruire les signaux sans dégrader la résolution temporelle. Chaque TL reçoit l’information de 2×64 anodes, ce qui permet une analyse spatiale de l’information, tout en réduisant le nombre de canaux de lecture, c’est-à-dire la durée de lecture. Le schéma simplifié du plan d’anodes et des lignes à transmission est illustré sur la Figure 1.18.

Le signal obtenu est amplifié par des amplificateurs rapides, puis numérisé par le dispositif SAMPIC (pour *Sampling Analog Memory for PICsecond time measurement*) [BRETON, DE CACQUERAY, DELAGNES et al. 2016], composé de 64 cellules analogiques et de 4 ASIC. Le signal obtenu est échantillonné avec une résolution de 5 ps RMS. Grâce à ce système d’acquisition de données, une cartographie des photoélectrons, appelée *carte d’impact*, peut être reconstruite. Celle-ci est d’autant plus profitable que le rendement de scintillation du PWO est faible, évitant ainsi de perdre l’information portée par les photons Tcherenkov. Grâce à un réseau de neurones et à la connaissance des propriétés de la chaîne de détection, les caractéristiques 4D (position et temps) de l’interaction gamma peuvent être déduites de l’analyse de ces cartes d’impact (barycentre, dispersion, temps de détection des photoélectrons).

L’hypothèse d’instrumenter également la face d’entrée du cristal avec une matrice de SiPM est également envisagée pour permettre d’améliorer la localisation du point d’interaction du rayon gamma dans le cristal.

1 Principe de détection et applications – 1.4 Le projet ClearMind

Au début de mon travail de thèse, les caractéristiques de la transmission à travers une couche mince étaient peu étudiées dans le cadre de ce projet. Le logiciel de simulation Monte Carlo Geant4 ne permettait pas de simuler le transport optique à travers une couche de passivation, ce qui était nécessaire pour modéliser les performances du module de détection ClearMind. Le chapitre suivant de mon manuscrit de thèse propose une analyse précise et complète des propriétés de ces couches dans le but d'étudier l'impact des spécifications de la couche mince (choix de l'oxyde, épaisseur) sur les performance du module de détection ClearMind et présente une mise à jour des méthodes utilisées dans Geant4 pour permettre la modélisation de couches minces lors de simulations optiques.

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince

Sommaire

2.1	Passivation du cristal et conséquence	61
2.2	Calcul de la transmittance théorique et implémentation dans Geant4 .	62
2.2.1	Calcul théorique des réflexions multiples au sein d'un matériau	62
2.2.1.1	À travers un cristal simple sans atténuation	62
2.2.1.2	À travers un cristal dont la longueur d'absorption dépend de la longueur d'onde du photon	63
2.2.1.3	À travers un cristal couplé à une photocathode	64
2.2.2	Implémentation d'une nouvelle fonction dans le logiciel Geant4 : CoatedDielectricDielectric()	65
2.2.2.1	Principe	65
2.2.2.2	Résultats	66
2.3	Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo	67
2.3.1	À travers une interface simple et une interface composée d'une couche mince	68
2.3.1.1	En fonction de la longueur d'onde, avec et sans couche mince	68
2.3.1.2	En fonction de l'angle d'incidence, pour différentes polarisations des photons	70
2.3.1.3	En fonction de l'épaisseur de la couche mince	71
2.3.2	À travers un cristal de PWO pourvu d'une couche mince	72
2.3.2.1	Impact de l'indice de réfraction sur la forme de la transmittance	73
2.3.2.2	Impact de l'épaisseur de la couche mince sur la valeur de la transmittance	75

2.3.3	À travers un cristal suivi d'une photocathode	76
2.3.3.1	Comparaison d'une photocathode bialcaline et multialcaline	76
2.3.3.2	Impact de la rugosité des surfaces	79
2.4	Estimation de l'absorbance d'une photocathode	82
2.4.1	Définition de l'absorbance	82
2.4.2	Impact de différents paramètres sur la variation de l'absorbance en fonction de la longueur d'onde	83
2.4.2.1	Impact de l'épaisseur de la photocathode	84
2.4.2.2	Selon le modèle de la photocathode	85
2.4.3	Importance de la transmission frustrée	86

Dans ce chapitre, nous étudions différentes structures : une interface composée d'une couche mince, un milieu épais passivé par des couches minces sur ses faces d'entrée et de sortie et pour finir ce même milieu auquel on a ajouté une photocathode en sortie, directement déposé sur la couche mince. L'évolution de la transmittance est étudiée en fonction de différents paramètres tels que la longueur d'onde ou l'angle d'incidence du faisceau de photons, ou bien en fonction des caractéristiques des milieux composant la structure (les indices de réfraction, l'épaisseur de la couche mince, les coefficients d'absorption, etc). Les résultats théoriques calculés sont comparés aux résultats obtenus par simulation Monte Carlo à partir d'une nouvelle implémentation dans le logiciel Geant4. Cette étude permet de comprendre au mieux le comportement d'une couche mince, et de valider le modèle implémenté, afin de simuler l'absorbance du faisceau de photons au sein d'une cellule test. L'importance de la transmission frustrée résultant de la présence de la couche mince dans le module de détection ClearMind est alors quantifiée.

2.1 Passivation du cristal et conséquence

Lors des études de faisabilité d'évaporation de couches photo-électriques sur les cristaux scintillants de PWO, il a fallu déposer une couche intermédiaire de passivation sur le cristal pour stabiliser la couche photo-électrique et éviter son altération au contact de l'oxygène ou du plomb présent dans la maille cristalline. Cette couche de passivation doit avoir la qualité de couche mince, tout en ayant une épaisseur et des propriétés chimiques qui permettent de protéger la photocathode.

Cette couche de passivation a une épaisseur d , inférieure à l'ordre de grandeur de la longueur d'onde des photons arrivant à sa surface (entre 350 et 700 nm) et par conséquent entraîne des phénomènes d'interférences propre au comportement d'une couche mince (Section 1.1.3.5).

Pour modéliser le comportement optique du détecteur, il faut considérer l'aspect

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.2 Calcul de la transmittance théorique et implémentation dans Geant4

ondulatoire de la lumière, qui est à l'origine du phénomène de transmission frustrée. Ce dernier se produit lorsqu'un photon traverse une couche mince avec une incidence supérieure à l'angle limite (Section 1.1.3.6). Les différents indices de réfraction des matériaux utilisés sont représentés en fonction de la longueur d'onde sur la Figure 2.1.

Le suivi individuel des photons par simulation Monte Carlo ne permet pas de prendre en compte les phénomènes d'interférences qui ont cours au sein d'une couche mince. Pour cela, il est nécessaire de considérer la couche mince comme une surface et de lui conférer une probabilité de transmission calculée à partir des coefficients de Fresnel. C'est dans ce but qu'une nouvelle fonction appelée CoatedDielectricDielectric() a été créée dans Geant4, l'outil de simulation Monte Carlo développé par la collaboration Geant4 [AGOSTINELLI, ALLISON, AMAKO et al. 2003] (Section 2.2.2).

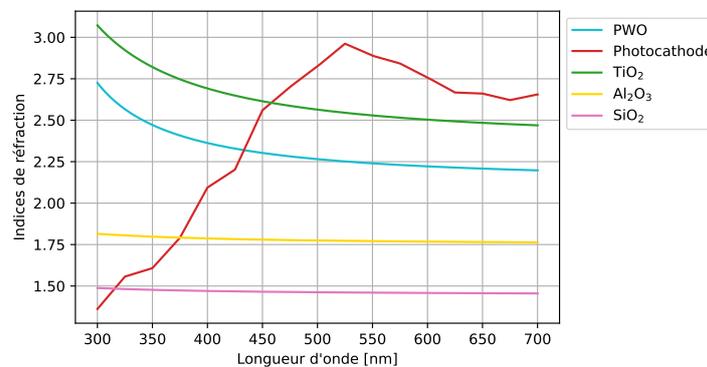


FIGURE 2.1 – Indices de réfraction des différents matériaux utilisés dans ce manuscrit ([HUANG et SEO 2007] pour le PWO, [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG et al. 2006] pour la photocathode, [POLYANSKIY 2023] pour l'Al₂O₃ et le TiO₂ et [MALITSON 1965] pour le SiO₂).

2.2 Calcul de la transmittance théorique et implémentation dans Geant4

2.2.1 Calcul théorique des réflexions multiples au sein d'un matériau

2.2.1.1 À travers un cristal simple sans atténuation

Cette démonstration s'appuie sur celle faite précédemment dans la Section 1.1.3.5, et sur la Figure 2.2a. Soit un cristal de PWO passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par une couche mince, comme représenté sur la Figure 2.2a. Notons A le milieu composé d'air dans lequel est positionné le cristal et B le PWO (en bleu sur le schéma). Les interfaces qui séparent les milieux A et B sont des interfaces constituées d'une couche mince d'épaisseur d . Notons T la transmittance du milieu A au milieu B et T_0 la probabilité que le photon traverse le cristal sans faire de réflexions. Ainsi, nous

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.2 Calcul de la transmittance théorique et implémentation dans Geant4

avons :

$$T_0 = T^2 \quad (2.1)$$

La probabilité T_1 que le photon passe du milieu A au milieu B, puis soit réfléchi deux fois consécutivement avant d'être transmis est donnée par :

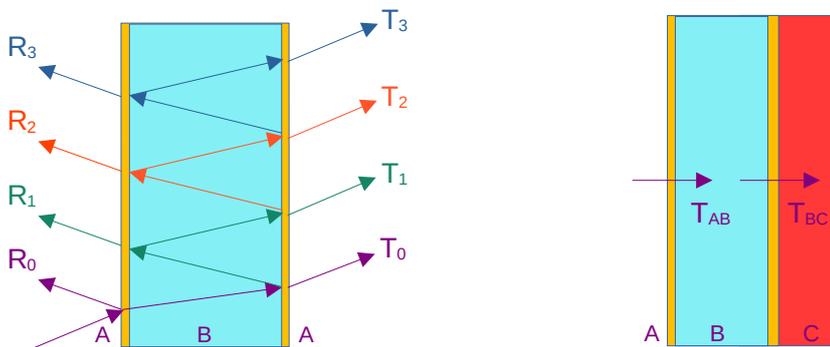
$$T_1 = T^2 R^2 \quad (2.2)$$

où R est la réflectance de l'interface entre les milieux A et B avec $R + T = 1$. De la même manière, on obtient :

$$T_i = T^2 R^{2i} \quad (2.3)$$

Avec T_i la transmittance à travers le cristal, après $2i$ réflexions consécutives à l'intérieur du cristal. La probabilité de transmission à travers le cristal T_{tot} est donnée par la somme de probabilités pour 0, 1, 2.. réflexions, qui correspond à une série géométrique convergent vers :

$$T_{tot} = T_0 + T_1 + T_2 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} T^2 R^{2i} = \frac{T^2}{1 - R^2} \quad (2.4)$$



(a) Schéma des réflexions multiples au sein du cristal. (b) Schéma d'un cristal suivi d'une photodiode (en rouge).

FIGURE 2.2 – Schéma d'un cristal (en bleu) passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par des couches minces (en jaune). Les couches minces sont alors considérées comme des interfaces, et non pas comme des milieux de propagation.

2.2.1.2 À travers un cristal dont la longueur d'absorption dépend de la longueur d'onde du photon

Le PWO est un matériau très absorbant aux longueurs d'onde inférieures à 350 nm. Sa longueur d'atténuation augmente progressivement avec la longueur d'onde jusqu'à

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.2 Calcul de la transmittance théorique et implémentation dans Geant4

ce que le cristal soit complètement transparent au-delà de 450 nm. Plus le nombre de réflexions est important au sein du cristal, plus la probabilité d'absorption est importante. La probabilité de ne pas être absorbé lors de son passage dans le cristal est notée a avec :

$$a = e^{-\mu(\lambda)x} \quad (2.5)$$

où x est la longueur du chemin parcouru dans le cristal (en mm) et μ est le coefficient d'atténuation linéique tel que :

$$\mu(\lambda) = \frac{1}{l(\lambda)} = \frac{4\pi\kappa(\lambda)}{\lambda} \quad (2.6)$$

où $l(\lambda)$ la longueur d'atténuation du cristal pour une longueur d'onde λ et $\kappa(\lambda)$ son coefficient d'extinction, tel que $\underline{n}(\lambda) = n(\lambda) + i\kappa(\lambda)$ avec $\underline{n}(\lambda)$ l'indice de réfraction complexe du matériau et $n(\lambda)$ l'indice de réfraction réel (Section 1.1.3.2).

Ainsi, lors de chaque aller-retour dans le cristal, le photon parcourt une distance $2x$ et a donc une probabilité a^2 de ne pas être absorbé.

En reprenant la Figure 2.2a, nous avons :

$$T_0 = aT^2 \quad (2.7)$$

$$T_1 = aT^2 R^2 a^2 \quad (2.8)$$

De la même manière que précédemment, nous retrouvons T_{tot} donné par :

$$T_{tot} = \frac{aT^2}{1 - (aR)^2} \quad (2.9)$$

2.2.1.3 À travers un cristal couplé à une photocathode

Si nous déposons une photocathode directement en sortie du cristal passivé, nous avons alors un troisième milieu C (Figure 2.2b). Dans ce cas, les transmittances T_{AB} et T_{BC} ne sont pas égales et les réflectances des interfaces AB et BC notées respectivement R_{AB} et R_{BC} non plus. En suivant la logique précédemment développée, nous obtenons :

$$T_{tot} = \frac{aT_{AB}T_{BC}}{1 - a^2R_{AB}R_{BC}} \quad (2.10)$$

Notons que :

- Si la réflectance de la première interface est nulle ($R_{AB} = 0$, donc $T_{AB} = 1$), alors la transmittance totale T_{tot} est calculée comme le produit de l'atténuation dans le cristal par la transmittance à travers la seconde interface T_{BC} .
- A l'inverse, si la réflectance sur la première interface est totale ($R_{AB} = 1$, donc $T_{AB} = 0$), alors la transmittance totale est nulle.

Le PWO étant très absorbant aux faibles longueurs d'onde, l'atténuation dans le cristal diminue avec l'augmentation de la longueur d'onde. Nous avons par exemple pour

une épaisseur parcourue x de 5 mm : $a = 0\%$ à 300 nm, $a \approx 55\%$ à 325 nm et a approche 100 % à partir de 400 nm.

2.2.2 Implémentation d'une nouvelle fonction dans le logiciel Geant4 : `CoatedDielectricDielectric()`

Geant4 est un logiciel de simulation Monte Carlo permettant de modéliser le transport des particules dans un milieu. Il permet à l'utilisateur de définir la géométrie du détecteur et l'émission de la particule primaire, puis dispose d'une technique de *tracking* permettant de suivre chacune des particules générées et leur interaction dans le milieu. La simulation de la détection du signal par Geant4 permet ainsi de déterminer la sensibilité et la résolution du système de détection modélisé.

2.2.2.1 Principe

Les surfaces avec un revêtement optique peuvent être utilisées notamment comme anti-reflet, mais également pour améliorer la transmission de la lumière entre un cristal scintillant et une photocathode. Il est donc nécessaire que le code Monte Carlo permette à l'utilisateur de simuler la probabilité de transmission d'un photon à travers une couche mince, qui prenne en compte les phénomènes d'interférences et de transmission frustrée. Pour cela, une nouvelle méthode, `CoatedDielectricDielectric()`, a été créée dans la classe `G4OpBoundaryProcess`. Cette fonction définit l'interaction d'une particule avec une interface entre deux milieux, en considérant uniquement les deux volumes extérieurs, c'est-à-dire dans notre cas le cristal et la photocathode, et les caractéristiques de la couche mince telles que son indice de réfraction et son épaisseur.

La méthode principale de la classe `G4OpBoundaryProcess` est `PostStepDoIt()`. Cette fonction commence par récupérer les indices de réfraction des deux milieux de part et d'autre de l'interface, qui est définie par les propriétés optiques `Type`, `Model` et `Finished`. Celles-ci entraînent l'appel à la méthode appropriée, pour gérer l'interaction du photon avec l'interface. Par exemple, la méthode `DielectricDielectric()` est appelée pour une interface de type `dielectricdielectric` définie entre deux milieux diélectriques.

La nouvelle méthode `CoatedDielectricDielectric()` permet de gérer les interactions du photon avec un nouveau Type d'interface appelé `coated`, qui est défini lorsque deux matériaux diélectriques sont séparés par une couche mince d'épaisseur `COATEDTHICKNESS` et d'indice de réfraction `COATEDRINDEX`. Pour se faire, elle utilise les formules des coefficients de réflexion et de transmission (Eq 1.34 et Eq 1.35) permettant de calculer la réflectance et la transmittance (Eq 1.24 et Eq 1.25). En fonction de l'angle d'incidence du photon sur l'interface, quatre cas sont décrits par `fStatus` :

- `CoatedDielectricReflection` et `TotalInternalReflection` : utilisés lorsque le photon est réfléchi par l'interface. Dans le premier cas, l'angle d'incidence est inférieur à l'angle limite défini entre le milieu actuel et la couche mince (ou bien il n'existe pas d'angle limite), le photon est alors simplement

réfléchi avec la réflectance correspondante sur le plan d'interface matérialisé par la couche mince. Dans le second cas, l'angle d'incidence est supérieur à l'angle limite et la réflexion est considérée comme totale, c'est-à-dire avec une réflectance égale à 1.

- `CoatedDielectricRefraction` et `CoatedDielectricFrustratedTransmission` : utilisés dans le cas d'une réfraction. De la même manière que pour la réflexion, le premier est employé lorsque l'angle d'incidence est inférieur à l'angle limite et le second correspond à une transmission frustrée, c'est-à-dire lorsque l'angle d'incidence est supérieur à l'angle limite entre le milieu dans lequel se trouve le photon et celui de la couche mince.

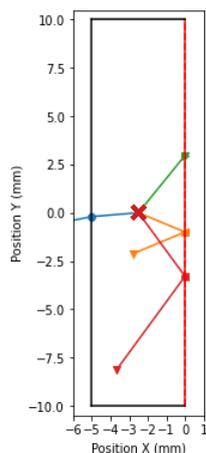
La transmission frustrée peut être activée ou désactivée grâce à la variable booléenne `frustrated`. Ce paramètre permet de mettre en avant l'importance de la transmission frustrée dans l'efficacité de collection lumineuse à travers une interface (Section 2.4.3).

2.2.2.2 Résultats

Afin de mettre en avant un exemple de *tracking* obtenu par le logiciel Geant4 lors de l'utilisation de cette nouvelle fonctionnalité, dix photons d'une longueur d'onde de 500 nm ont été générés de manière isotrope au centre d'un cristal cylindrique de 10 mm de rayon et 5 mm d'épaisseur. Le cristal est positionné dans l'air comme représenté sur la Figure 2.3a. Les faces d'entrée et de sortie du cristal sont passivées par une couche mince de 100 nm d'épaisseur. L'angle limite entre le cristal et la couche mince est de 51.6° à 500 nm. Enfin, une photocathode ultra-absorbante de 25 nm d'épaisseur a été déposée sur la couche mince. On négligera l'effet de couche mince de la photocathode étant donné qu'il s'agit d'un milieu très absorbant. La trajectoire des photons et leurs interactions au sein du cristal sont suivies par *tracking optique* dans Geant4. Pour illustration, quatre trajectoires parmi les dix simulées sont présentées dans les Figures 2.3a et 2.3b et décrites ci-dessous :

1. *eventID 1* : Le photon (trajectoire bleu) se dirige vers la face d'entrée du cristal avec un angle d'incidence inférieur à l'angle limite. Il est transmis à travers la couche mince par une `CoatedDielectricRefraction`, puis est perdu en sortant du *World*.
2. *eventID 2* : Le photon (trajectoire orange) se propage en direction de la photocathode avec un angle d'incidence inférieur à l'angle limite. Il est réfléchi au contact de l'interface composée de la couche mince, l'interaction est donc répertoriée comme étant une `CoatedDielectricReflection`. Le photon est finalement absorbé par le cristal (*b'OpAbsorption*)
3. *eventID 3* : Le photon (trajectoire verte) se dirige vers la photocathode avec un angle d'incidence supérieur à l'angle limite. Il est transmis à travers la couche mince grâce au phénomène de transmission frustrée, il s'agit donc d'une `CoatedDielectricFrustratedTransmission`, puis termine sa course en étant absorbé par la photocathode.

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo



eventID	opticalProcessName	prevVolumePhys	postVolumePhys	postProcessDefinedStep
1	b'CoatedDielectricRefraction'	b'Crystal1'	b'World'	b'Transportation'
1	b'NULL'	b'World'	b'NULL'	b'Transportation'
2	b'CoatedDielectricReflection'	b'Crystal1'	b'Photocathode'	b'Transportation'
2	b'StepTooSmall'	b'Photocathode'	b'Crystal1'	b'Transportation'
2	b'NULL'	b'Crystal1'	b'Crystal1'	b'OpAbsorption'
3	b'FrustratedTransmission'	b'Crystal1'	b'Photocathode'	b'Transportation'
3	b'NULL'	b'Photocathode'	b'Photocathode'	b'OpAbsorption'
4	b'TotalInternalReflection'	b'Crystal1'	b'Photocathode'	b'Transportation'
4	b'StepTooSmall'	b'Photocathode'	b'Crystal1'	b'Transportation'
4	b'NULL'	b'Crystal1'	b'Crystal1'	b'OpAbsorption'

- (a) Schéma de la cellule test et des trajectoires des quatre photons (Figure 2.3b). En noir le cristal, en rouge la photocathode et en bleu, orange, vert et rouge les trajectoires des photons (générés sur la croix rouge) pour les *eventID* 1, 2, 3 et 4, respectivement.
- (b) Exemples de *tracking* de photons utilisant la nouvelle fonctionnalité implémentée dans Geant4. Le détecteur est constitué d'un cristal cylindrique de 10 mm de rayon et 5 mm d'épaisseur passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par le dépôt d'une couche mince. Une photocathode bialcaline (modélisée suivant le modèle de Harmer *et al.* [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG *et al.* 2006]) est déposée sur la face de sortie. Sur dix photons générés, quatre ont été retenus pour illustration et sont présentés dans ce tableau. L'*opticalProcessName* représente l'interaction ayant eu lieu à l'interface entre le *prevVolumePhys* et *postVolumePhys*. Le *postProcessDefinesStep* représente le devenir de l'énergie portée par le photon. Elle subit soit une (*b'Transportation'*) dans le cas d'une interaction avec l'interface, soit une (*b'OpAbsorption'*) dans le cas d'une absorption dans le milieu. Les trajectoires des quatre photons sont présentées sur la Figure 2.3a.

FIGURE 2.3 – (a) Schéma des trajectoires et (b) exemples de *tracking* de photons utilisant la nouvelle fonctionnalité implémentée dans Geant4.

4. *eventID* 4 : Enfin, le dernier photon (trajectoire rouge) est réfléchi à l'interface entre le cristal et la photocathode avec un angle d'incidence supérieur à l'angle limite entre le cristal et la couche mince composant l'interface. Il subit donc une *TotalInternalReflection*, avant d'être absorbé par le cristal.

2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

Dans cette section, nous étudions l'évolution de la transmittance en fonction de divers paramètres tels que la longueur d'onde (pour un angle d'incidence normal et une épaisseur des couches minces de 100 nm), l'angle d'incidence du faisceau

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

lumineux (pour une longueur d'onde de 500 nm et une épaisseur des couches minces de 100 nm), ou encore l'épaisseur de la couche de passivation (pour un angle d'incidence normal et une longueur d'onde de 500 nm). La longueur d'onde de 500 nm a été choisie pour visualiser la transmission frustrée à travers la couche mince pour un angle d'incidence supérieur à l'angle limite entre le cristal et la couche mince, soit 51.6° à 500 nm (car $n_{CM} < n_{PWO} < n_{PC}$). Cette étude sera menée dans trois cas :

- Dans un premier temps, nous verrons le cas d'une unique interface constituée d'une couche mince déposée sur la face d'un cristal. Ce premier cas sera lui-même subdivisé en deux cas : une interface air/cristal, et une interface du cristal/photocathode (T_{AB} et T_{BC} sur la Figure 2.2b, respectivement).
- Dans un second temps nous étudierons la transmission à travers un cristal pourvu d'une couche mince d' Al_2O_3 sur ses faces d'entrée et de sortie (Figure 2.2a).
- Pour finir nous étudierons la transmittance à travers le cristal pourvu de couches minces d' Al_2O_3 sur ses faces d'entrée et de sortie auquel s'ajoute une photocathode directement déposée sur sa face de sortie passivée (Figure 2.2b).

Les caractéristiques des matériaux utilisés pour la simulation sont celles présentées dans la Section 1.4, avec les indices de réfraction du PWO obtenus à partir de l'équation de Huang et Seo. [HUANG et SEO 2007] (nous prendrons la moyenne de l'indice de réfraction ordinaire et extraordinaire), la longueur d'absorption déduite de l'article de Annenkov *et al.* [ANNENKOV, KORZHIK et LECOQ 2002] et l'indice de réfraction de la photocathode estimé d'après le modèle de Harmer *et al.* [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG *et al.* 2006].

Lors de cette étude, le plan d'incidence se trouvera uniquement dans le plan XY pour faciliter l'analyse.

Dans les figures présentées ci-dessous, les transmittances théoriques (c'est-à-dire calculées analytiquement) sont représentées par des lignes continues et les transmittances calculées par la simulation Geant4 par des points. L'incertitude sur la transmittances étant négligeable (avec 50 000 photons simulés), les barres d'erreur ne sont pas représentées.

2.3.1 À travers une interface simple et une interface composée d'une couche mince

2.3.1.1 En fonction de la longueur d'onde, avec et sans couche mince

Le rendement de scintillation du PWO est présenté dans la Section 1.4.0.1. Le spectre d'émission du PWO couvre de 300 nm à 700 nm avec un maximum de scintillation à 420 nm. Comme l'indice de réfraction dépend de la longueur d'onde, la transmittance varie également en fonction de ce paramètre.

La Figure 2.4a montre la transmittance de photons de l'air dans un cristal de PWO à travers une couche mince d'épaisseur 100 nm (trait continu) ou sans couche mince (traitillé) pour une incidence normale. Dans le cas de l'interface composée d'une couche mince, on constate une transmittance supérieure à 82% pour toutes les lon-

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

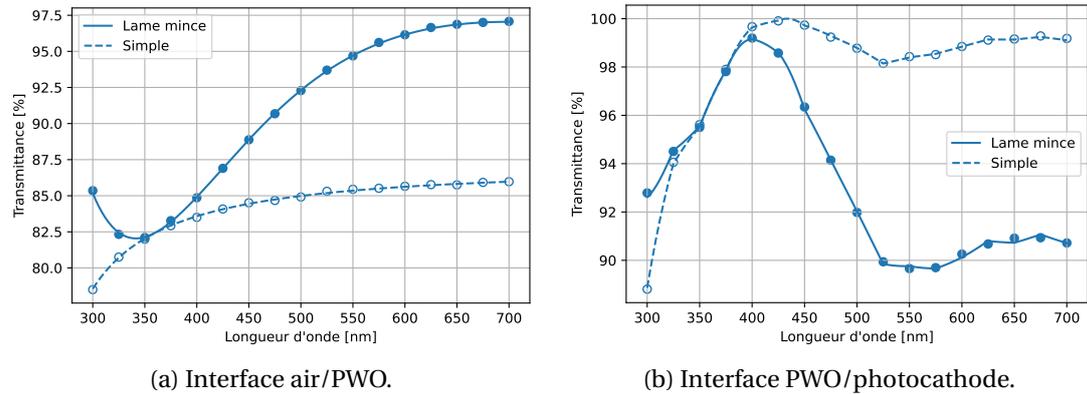


FIGURE 2.4 – Transmittance théorique de photons d'incidences normales sur une interface (a) air/PWO et (b) PWO/photocathode avec (trait continu et marqueurs pleins) et sans (traitillé et marqueurs vides) couche mince de 100 nm d'épaisseur.

guez d'onde. Pour l'intégralité du spectre étudié, la transmittance à travers une couche mince (CM) est supérieure à la transmittance à travers une interface simple entre l'air et le cristal. Dans ce cas précis, nous avons $n_{air} < n_{CM} < n_{PWO}$. La couche mince possédant un indice de réfraction intermédiaire, la transmission à chaque dioptré se fait entre milieux d'indices de réfraction plus proches. Ceci permet au photon d'être transmis plus facilement de dioptré en dioptré, et augmente ainsi la transmittance totale.

La Figure 2.4b montre la transmittance de photons, d'un cristal de PWO (dénotté ci-après milieu 1) vers la photocathode (dénotté ci-après milieu 3), de manière directe (traitillé), ou à travers une couche mince (dénotté ci-après milieu 2) d'épaisseur 100 nm (trait continu), pour une incidence normale. On constate une transmittance toujours supérieure à 85% pour toutes les longueurs d'onde, avec un minimum à 300 nm et un maximum à 400 nm. Le maximum du spectre d'émission du PWO est à 420 nm. Ce maximum de transmittance nous permet d'espérer un rendement de collection lumineuse optimal. Dans cette situation et en nous basant sur la Figure 2.1, nous distinguons trois cas :

1. Pour les longueurs d'onde de 300 à 375 nm : $n_3 < n_2 < n_1$. Ce cas est semblable à l'analyse précédente : la présence de la couche mince permet de diminuer l'écart entre les indices de réfraction rencontrés successivement lors du parcours du photon. La transmittance en présence d'une couche mince intermédiaire est donc supérieure à la transmittance à travers une interface simple du milieu 1 vers le milieu 3. Cependant, l'écart entre les deux transmittances diminue significativement à cause de l'augmentation rapide de l'indice de réfraction de la photocathode. La transmittance dans le cas d'une interface simple devient alors supérieure à partir de 376 nm.
2. De 376 à 433 nm : $n_2 < n_3 < n_1$. L'écart entre n_1 et n_3 se réduit, l'angle limite entre

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

le milieu 1 et le milieu 3 tend donc à disparaître et la transmittance à travers l'interface simple séparant ces deux milieux augmente, jusqu'à atteindre son maximum à 433 nm.

Dans le cas d'une interface composée d'une couche mince, $n_2 < n_3$ et il n'y a par conséquent pas de réflexion totale entre ces deux milieux. Cependant, l'écart entre les deux indices de réfraction augmente, ce qui tend à diminuer la transmittance. D'autre part, n_1 est toujours supérieur à n_2 et l'écart entre ces deux indices de réfraction diminue légèrement avant de devenir pratiquement constant. La combinaison de ces deux informations a pour conséquence une transmittance à travers l'interface composée d'une couche mince qui augmente légèrement avec la longueur d'onde, avant que d'atteindre un maximum à 400 nm puis de diminuer.

- De 434 à 700 nm : $n_2 < n_1 < n_3$. L'augmentation de n_3 ne fait qu'agrandir l'écart entre les indices de réfraction, ce qui induit une chute des transmittances jusqu'à 525 nm, où n_3 est maximal. Les transmittances augmentent ensuite légèrement, avec la diminution de l'indice de réfraction de la photocathode. La présence de la couche mince ne permet pas une meilleure transmittance du cristal à la photocathode, car son indice de réfraction est inférieure à celui du milieu 1.

Cette analyse nous montre que la transmittance d'un photon à travers un dioptré est très dépendante de l'écart entre les indices de réfraction des deux milieux successivement traversés.

2.3.1.2 En fonction de l'angle d'incidence, pour différentes polarisations des photons

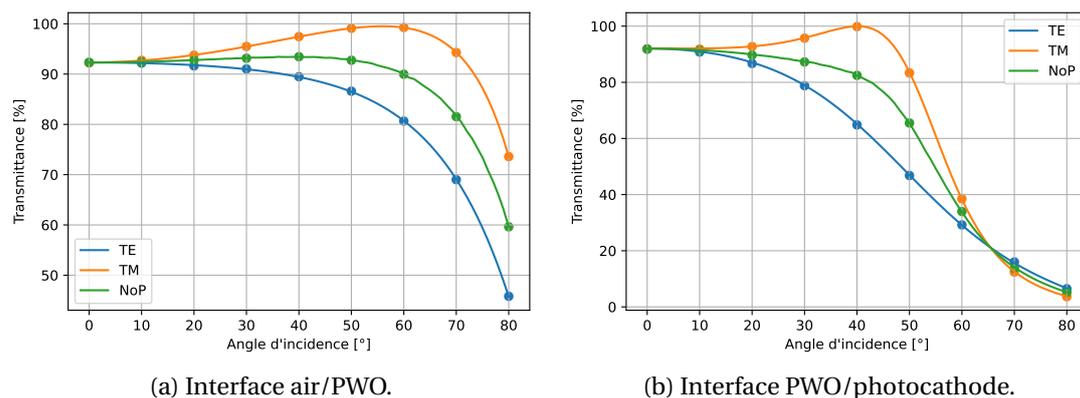


FIGURE 2.5 – Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) de photons de 500 nm polarisés perpendiculairement (TE) ou parallèlement (TM) au plan d'incidence ou non-polarisés (NoP) en fonction de l'angle d'incidence sur une interface (a) air/PWO et (b) PWO/photocathode à travers une couche mince de 100 nm d'épaisseur.

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

Dans cette étude, nous considérons à nouveau deux cas en fonction de l'angle d'incidence, pour une longueur d'onde fixe et une onde polarisée perpendiculairement (TE) ou parallèlement (TM) au plan d'incidence, ou non-polarisée (NoP).

Dans le premier cas (Figure 2.5a), nous étudions la transmittance à travers une interface composée d'une couche mince de 100 nm d'épaisseur séparant l'air et le cristal. Dans le second cas (Figure 2.5b), nous étudions une interface composée d'une couche mince de 100 nm d'épaisseur séparant le cristal et la photocathode. Dans les deux cas, nous constatons que pour une onde non-polarisée, la transmittance est bornée entre celles obtenues pour les polarisations TE (borne inférieure) et TM (borne supérieure).

Dans le second cas, à 500 nm, nous avons $n_{CM} < n_{PWO} < n_{PC}$. Nous pouvons calculer un angle limite de 51.6° entre le cristal et la couche mince, qui induit une réflexion totale pour des incidences supérieures. Néanmoins nous observons une transmittance vers la photocathode non nulle. Ceci est dû au phénomène de transmission frustrée à travers la couche mince.

2.3.1.3 En fonction de l'épaisseur de la couche mince

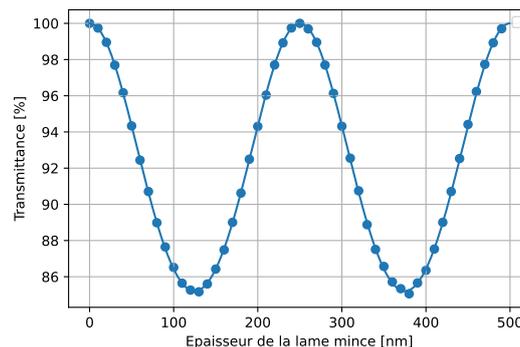


FIGURE 2.6 – Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) de photons d'incidences normales sur une interface entre deux prismes d'indice de réfraction 1.5, en fonction de l'épaisseur de la couche mince d'air les séparant, pour une longueur d'onde de 500 nm.

Un des paramètres importants jouant sur la transmittance d'un photon à travers une couche mince est l'épaisseur de cette couche. Dans ce paragraphe, nous étudions la transmittance d'un photon d'incidence normale sur une couche mince en fonction de l'épaisseur de celle-ci.

Commençons par étudier la transmittance à travers une couche mince d'air séparant deux prismes identiques d'indice de réfraction 1.5. La transmittance obtenue en fonction de l'épaisseur de la couche mince d'air est représentée sur la Figure 2.6. Sur ce graphique nous observons que la transmittance est une sinusoïde de période 250 nm, soit d'une demi longueur d'onde $\frac{\lambda}{2}$. Elle atteint son maximum à 500 nm (et par conséquent à 0 et 250 nm), et son minimum à 125 nm (et par conséquent à

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

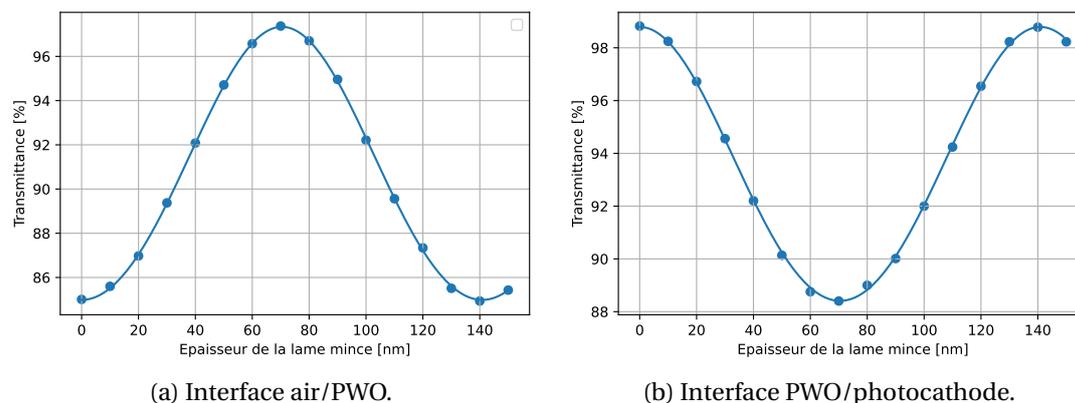


FIGURE 2.7 – Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) de photons d'incidences normales sur une interface (a) air/PWO et (b) PWO/photocathode en fonction de l'épaisseur de la couche mince d' Al_2O_3 pour une longueur d'onde de 500 nm.

375 nm). Ce phénomène de déphasage est utilisé dans le cas des lames à retard. Le matériau utilisé pour ce type de couche est un matériau biréfringent. Une des deux composantes de la polarisation (TE et TM) se propage le long de l'axe optique, elle se déplace alors plus vite que l'autre, ce qui induit un déphasage dépendant du matériau, de la longueur d'onde et de l'épaisseur de la lame à retard. Les lames à retard les plus connues sont les couches quart d'onde ($\frac{\lambda}{4}$) et demi onde ($\frac{\lambda}{2}$).

Si nous revenons à notre cas d'étude, la Figure 2.7a montre la transmittance de photons de 500 nm à travers une interface, composée d'une couche mince, entre l'air et le cristal de PWO. La Figure 2.7b présente la transmittance à travers cette même couche mince séparant le cristal de PWO et la photocathode. Les extrema sont atteints à 70 nm et 140 nm dans les deux cas. Dans le premier cas on constate que la transmittance minimale est atteinte pour une épaisseur nulle de la couche mince. Dans le second cas, c'est la transmittance maximale qui est atteinte en l'absence de couche mince. Ces deux constatations confirment l'analyse qui a été faite dans la Section 2.3.1.1, en se référant à la longueur d'onde de 500 nm.

2.3.2 À travers un cristal de PWO pourvu d'une couche mince

Dans cette section, il ne s'agit plus d'étudier la transmittance à travers une seule interface, mais de s'intéresser à la transmittance totale à travers un cristal de PWO de 5 mm d'épaisseur, passivé, sur ses faces d'entrée et de sortie, par une couche mince. Ainsi, nous prenons en compte les réflexions multiples pouvant avoir lieu au sein du cristal, telle quelles sont représentées sur la Figure 2.2a. Le calcul théorique est détaillé dans la Section 2.2.1. Les photons sont générés dans l'air en amont du cristal. Nous considérons la transmittance à travers le cristal pour une incidence normale et nous

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

études l'impact de l'indice de réfraction de la couche mince et de son épaisseur.

2.3.2.1 Impact de l'indice de réfraction sur la forme de la transmittance

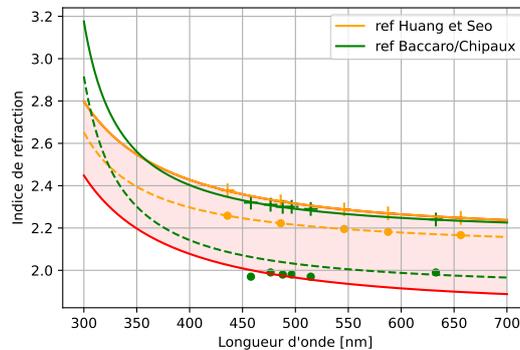


FIGURE 2.8 – Indices de réfraction ordinaires et extraordinaires du PWO tirés de la littérature. Les marqueurs croix et les marqueurs ronds représentent les mesures d'indice ordinaire et extraordinaire, respectivement. Les courbes d'indices ordinaires apparaissent en trait continu et les courbes d'indices extraordinaires en traitillé. Dans leur article [HUANG et SEO 2007], les auteurs effectuent les mesures sur un cristal non-dopé et déterminent une formule modifiée de l'équation de Sellmeier permettant d'exprimer l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde à partir des coefficients de Sellmeier (Eq 3.1). Les mesures représentées par les marqueurs verts ont été effectuées par Baccaro *et al.* [BACCARO, L M BARONE, BORGIA et al. 1995] sur un cristal non-dopé de 23 cm de long et ont été réutilisées par Chipaux qui détermine une relation entre l'indice de réfraction et la longueur d'onde [CHIPAUX 1995]. La bande rouge représente les indices de réfraction étudiés dans cette section.

L'indice de réfraction peut varier pour différents cristaux de PWO, par exemple en fonction de leur dopage, ou bien encore en fonction de l'orientation du cristal par rapport à l'axe optique du cristal (Section 1.4.0.1 PWO et biréfringence).

Afin d'observer au mieux l'impact de l'indice de réfraction sur la transmittance, nous avons largement balayé les indices de réfraction possibles (Figure 2.8), allant de l'indice ordinaire fourni par l'équation de Huang et Seo [HUANG et SEO 2007] ($n_{ordinaire}$), jusqu'à un indice extraordinaire proche de celui donné par CMS [BACCARO, L M BARONE, BORGIA et al. 1995] et utilisés par Chipaux [CHIPAUX 1995] ($n_{extraordinaire}$). Les indices extraordinaires choisis sont calculés à partir des indices ordinaires donnés par l'équation de Huang et Seo, auxquels on soustrait 0.35. Cette valeur, choisie de manière empirique, nous permet d'étudier toutes les valeurs d'indice de réfraction trouvées dans la littérature. Les valeurs sélectionnées sont notées en pourcentage d'indice de réfraction ordinaire. Ainsi, un pourcentage $p = 0\%$ correspond à un indice

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

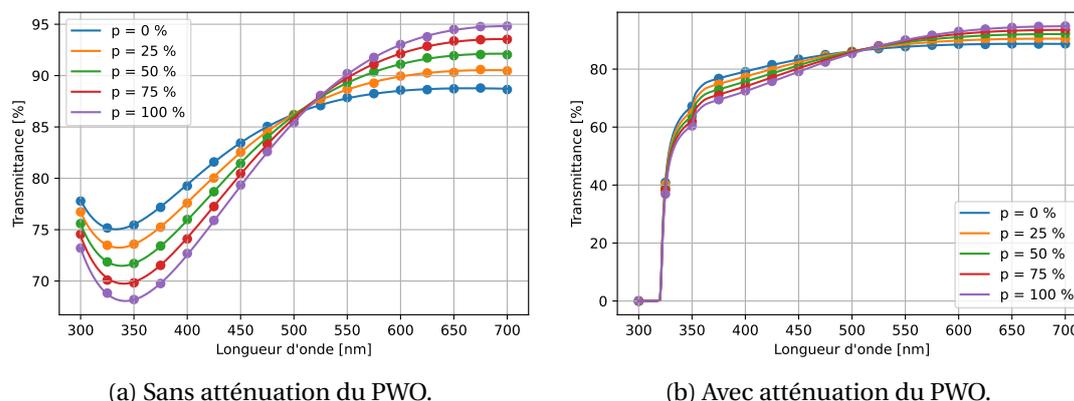


FIGURE 2.9 – Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) en fonction de la longueur d'onde de photons non-polarisés d'incidences normales sur un cristal de PWO passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par une couche mince de 100 nm d'épaisseur (a) sans et (b) avec atténuation dans le PWO. La transmittance est étudiée pour différentes valeurs de l'indice de réfraction variant de 0% de l'indice ordinaire (n extraordinaire) à 100% de l'indice ordinaire (n ordinaire). La longueur d'absorption du cristal en fonction de la longueur d'onde est tirée de l'étude d'Annenkov *et al.* [ANNENKOV, KORZHIK et LECOQ 2002].

purement extraordinaire (indice faible) tandis qu'un pourcentage $p = 100\%$ correspond à un indice purement ordinaire (indice élevé).

L'indice optique varie en fonction de l'orientation du cristal et de la direction du photon incident. Pour une incidence normale parallèle à l'axe optique du cristal (cas où le plan d'interface est orthogonal à l'axe optique du cristal), l'indice de réfraction est l'indice ordinaire ($p = 100\%$). Pour une incidence normale perpendiculaire à l'axe optique du cristal (cas où le plan d'interface est parallèle à l'axe optique du cristal), l'indice de réfraction est équivalent à la moyenne de l'indice ordinaire et de l'indice extraordinaire ($p = 100\%$). Néanmoins, dans cette étude, nous analyserons la transmittance pour un indice de réfraction allant de $p = 0\%$ à $p = 100\%$ pour avoir une plus large vision de l'impact de l'indice de réfraction sur la transmittance à travers la couche mince.

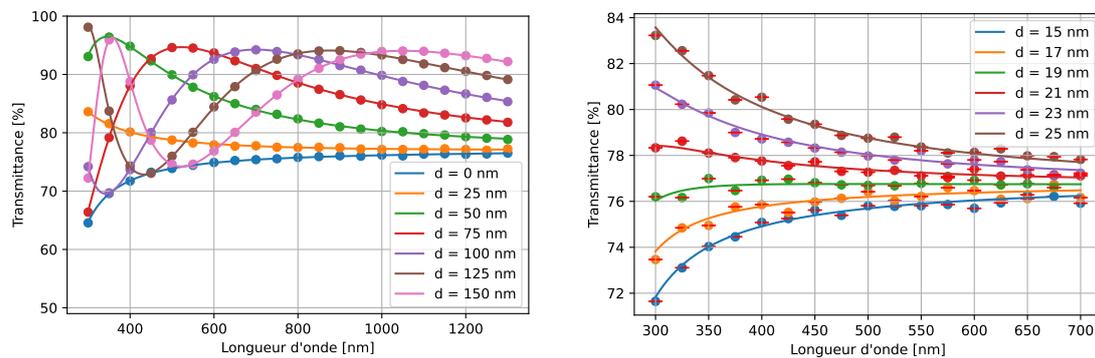
La transmittance en fonction de la longueur d'onde pour différents pourcentages d'indices de réfraction ordinaires est donnée dans les Figures 2.9a (sans atténuation par le PWO) et 2.9b (avec atténuation par le PWO). Les valeurs théoriques ont été obtenues en suivant le calcul présenté aux Section 2.2.1.1 (sans atténuation) et 2.2.1.2 (avec atténuation). Le cristal de PWO étant absorbant seulement aux faibles longueurs d'onde, les deux figures ne divergent que pour les longueurs d'onde inférieures à 400 nm. Pour cette raison, et pour faciliter la lecture graphique, les simulations suivantes seront menées sans absorption par le cristal.

Pour de faibles longueurs d'onde, la transmittance maximale est atteinte lorsque

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

l'indice de réfraction tend vers un indice extraordinaire ($p = 0\%$). A partir de 510 nm, la tendance s'inverse. Ainsi, on constate que l'indice de réfraction a un impact sur l'inclinaison de la courbe. Plus l'indice de réfraction tend vers un indice faible (n extraordinaire), plus la courbe de transmittance est plate en fonction de la longueur d'onde.

2.3.2.2 Impact de l'épaisseur de la couche mince sur la valeur de la transmittance



(a) Épaisseurs des couches minces de 0 à 150 nm par pas de 25 nm. (b) Épaisseurs des couches minces de 15 à 25 nm par pas de 2 nm.

FIGURE 2.10 – Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) en fonction de la longueur d'onde de photons non-polarisés d'incidences normales sur un cristal de PWO passivé par une couche mince d' Al_2O_3 sur ses faces d'entrée et de sortie (a) pour des épaisseurs de 0 à 150 nm par pas de 25 nm et (b) pour des épaisseurs de 15 à 25 nm par pas de 2 nm.

Dans cette Section, nous étudions l'impact de l'épaisseur de la couche de passivation sur la transmittance de photons non-polarisés à travers un cristal de PWO. Comme vu à la Section 2.3.1.3, l'épaisseur de la couche mince a un impact sur la transmittance à travers l'interface. En prenant en compte les réflexions multiples au sein du cristal, nous cherchons à observer le comportement en fonction de l'épaisseur de la couche mince.

Afin d'analyser complètement ce comportement, une première simulation a été menée jusqu'aux longueurs d'onde élevées (1300 nm), et pour des épaisseurs de couches allant de 0 nm (interface simple) à 150 nm. Les résultats sont présentés sur la Figure 2.10a.

De même que pour la Figure 2.4a, qui représente la transmittance en fonction de la longueur d'onde, la transmittance obtenue pour une interface simple (0 nm d'épaisseur) est inférieure aux transmittances à travers une couche mince, quelle que soit la longueur d'onde. La couche mince jouant le rôle d'une pseudo lame à retard,

les courbes de transmittance en fonction de l'épaisseur de la couche présentent des oscillations. Plus la couche est épaisse, plus le rapport longueur d'onde sur épaisseur est petit et plus l'oscillation des ondulations est importante aux faibles longueurs d'onde. Les transmittances tendent ensuite à se stabiliser vers les longueurs d'onde de l'ordre du micromètre. La transmittance la plus importante est ici obtenue pour des couches minces plus épaisses dû au phénomène de lame à retard.

Une étude a été menée pour des pas d'épaisseurs plus faibles. La Figure 2.10b présente les transmittances totales à travers un cristal passivé par différentes épaisseurs de couche mince. On remarque que dans le cas étudié, plus l'épaisseur de la couche est importante et plus la transmittance obtenue est élevée, dû à l'effet lame à retard de la couche mince. L'épaisseur de la couche mince joue donc un rôle sur la transmittance à travers le cristal, qui prend en compte les phénomènes d'interférences entre les réflexions multiples dans la couche mince.

2.3.3 À travers un cristal suivi d'une photocathode

Il existe plusieurs types de photocathodes qui se distinguent en fonction de leur composition, de leur efficacité quantique, leur temps de réponse, leur forme, ou bien de leur indice de réfraction. Dans cette section, nous étudierons par simulation Monte Carlo l'impact du dépôt d'une photocathode sur notre cristal passivé par une couche mince de 100 nm d'épaisseur. Les photons sont générés dans l'air en amont du cristal, et nous étudierons la transmittance totale vers la photocathode pour une incidence normale.

2.3.3.1 Comparaison d'une photocathode bialcaline et multialcaline

Trois modèles de photocathode sont simulés :

- Une photocathode multialcaline S20 caractérisée par Hallensleben *et al.* [HALLENSLEBEN, S.W HARMER et TOWNSEND 2000]. Dans cet article, les caractéristiques de deux photocathodes multialcalines sont étudiées en détail, à partir de mesures de réflectance, de transmittance et d'absorbance pour des longueurs d'onde de 360 à 900 nm et pour différents angles d'incidence. Les photocathodes sont conservées dans des tubes standards tout au long de l'expérience pour se rapprocher des résultats obtenus lors de leur utilisation dans un détecteur. Le PMT utilisé dans ce travail est un PMT EMI 9659QAM (EMI étant aujourd'hui commercialisé par ETL, Electron Tube Limited, Ruislip, UK), composé d'une photocathode multialcaline S20.
- Une photocathode bialcaline bleue d'après le modèle de Motta et Schönert [MOTTA et SCHÖNERT 2005]. Seules les données correspondant à la photocathode bialcaline KCsSb (bleue) ont été utilisées dans ce travail de thèse. La seconde photocathode RbCsCb (vert) mentionnée dans le travail de Motta et Schönert n'a pas été étudiée ici car son absorption de la lumière bleue (lumière Tcherenkov) est bien moins importante. De la même manière que l'auteur précédemment cité, Motta et Schönert effectuent une étude de l'absorbance, de la transmittance

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

et de la réflectance pour des longueurs d'onde allant de 380 à 680 nm. Ils ajoutent à cela une étude dite *d'ellipsométrie*, qui consiste à faire varier la polarisation de la lumière. Ils étudient également ces paramètres en conservant la photocathode au sein d'un PMT. Celui correspondant à la photocathode retenue est un PMT 9102B de ETL.

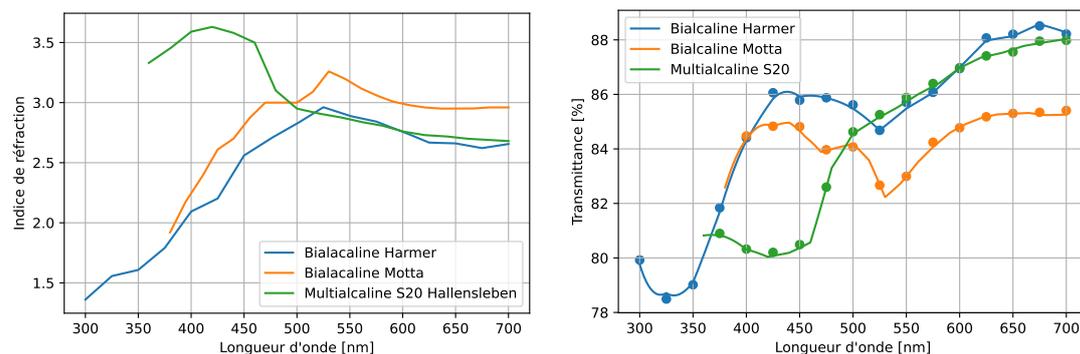
- Une photocathode bialcaline bleue d'après le modèle de Harmer *et al.* [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG et al. 2006]. Dans leur article, Harmer *et al.* étudient les variations de la permittivité selon le type de photocathode. Pour cela, ils comparent quatre photocathodes S20 et une photocathode bialcaline bleue K₂CsSb (9635 QB from EMI), dont ils mesurent la réflectance en fonction de l'épaisseur de la couche photo-électrique, pour des longueurs d'onde allant de 250 à 950 nm. La permittivité électrique ϵ est un nombre complexe égale au carré de l'indice de réfraction complexe du matériau. Ainsi nous avons :

$$\epsilon = \epsilon' + i\epsilon'' = \underline{n}^2 = (n + i\kappa)^2 = n^2 - \kappa^2 + i2n\kappa \quad (2.11)$$

Les parties réelles et imaginaires de chaque terme étant respectivement égales, nous obtenons deux équations à deux inconnues, n et κ , qui sont donc déduites à partir des résultats présentés dans l'article en résolvant ces deux équations. Nous avons choisi de n'utiliser que les données concernant la photocathode bialcaline, car ce modèle est le seul compatible avec notre technologie de couches de passivation et notre cristal de PWO.

Soucieux de connaître l'impact de différents modèles de photocathodes sur la transmittance, le modèle de photocathode multialcaline de Hallensleben *et al.* (dont Harmer est deuxième auteur) [HALLENSLEBEN, S.W HARMER et TOWNSEND 2000] a été retenu pour être comparés aux deux modèles de photocathodes bialcalines de Motta et Schönert [MOTTA et SCHÖNERT 2005] et Harmer *et al.* [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG et al. 2006].

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo



- (a) Indices de réfraction des trois modèles de photocathodes étudiés. En bleu et orange, les indices de réfraction de photocathodes bialcalines suivant les modèles de Harmer *et al.* [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG *et al.* 2006] et de Motta et Schönert [MOTTA et SCHÖNERT 2005], respectivement. En vert une photocathode multialcaline S20 suivant le modèle de Hallensleben *et al.* [HALLENSLEBEN, S.W HARMER et TOWNSEND 2000].
- (b) Transmittance théorique (trait) et déduite après simulation Monte Carlo (marqueurs) en fonction de la longueur d'onde pour des photons non-polarisés d'incidences normales sur un cristal passivé par une couche mince d' Al_2O_3 de 100 nm d'épaisseur suivi d'une photocathode. La transmittance totale est étudiée en fonction du modèle de photocathode.

FIGURE 2.11 – (a) Indices de réfraction des trois modèles de photocathodes étudiées et (b) transmittances obtenues en fonction du modèle de photocathode.

La Figure 2.11a présente la différence entre les indices de réfraction des trois modèles de photocathodes étudiés. Les indices de réfraction des deux photocathodes bialcalines sont semblables, bien que celle suivant le modèle de Motta et Schönert présente un indice de réfraction plus élevé que celle suivant le modèle de Harmer *et al.*.

L'indice de réfraction de la photocathode multialcaline est bien plus élevé aux faibles longueurs d'onde. Ce modèle de photocathode permet souvent d'obtenir une meilleure efficacité quantique, d'environ 30 %, contre 25 % pour les photocathodes bialcalines.

La Figure 2.11b présente les transmittances totales, de l'air vers la photocathode, pour les trois cas étudiés. On constate que la dépendance de la transmittance à l'indice de réfraction de la photocathode est d'autant plus importante que la longueur d'onde est élevée. Ainsi, pour les longueurs d'onde supérieures à 400 nm, la transmittance la plus élevée est obtenue pour la photocathode ayant l'indice de réfraction le plus faible (modèle de Harmer *et al.*) et la forme de la courbe de la transmittance est sensiblement régie par la forme de la courbe de l'indice de réfraction. Le maximum de transmittance aux faibles longueurs d'onde est atteint par les modèles de Motta et Schönert et de Harmer *et al.*, qui ont un indice de réfraction plus proche de celui de la couche mince, ce qui facilite la transmission à travers le dioptre.

Cette étude nous a permis de mettre en avant les différences existants entre les différents modèles de photocathode. Il est important de souligner que pour un même

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

modèle, l'indice de réfraction et l'efficacité quantique de la couche photo-électrique varie énormément en fonction de la fabrication et du dépôt du matériau [MOTTA et SCHÖNERT 2005].

Notons que le modèle de Motta et Schönert n'est pas défini pour des longueurs d'onde inférieures à 380 nm. Souhaitant simuler une photocathode bialcaline, le modèle de Harmer *et al.* a été choisi pour la simulation des photocathodes dans la suite de ce travail.

2.3.3.2 Impact de la rugosité des surfaces

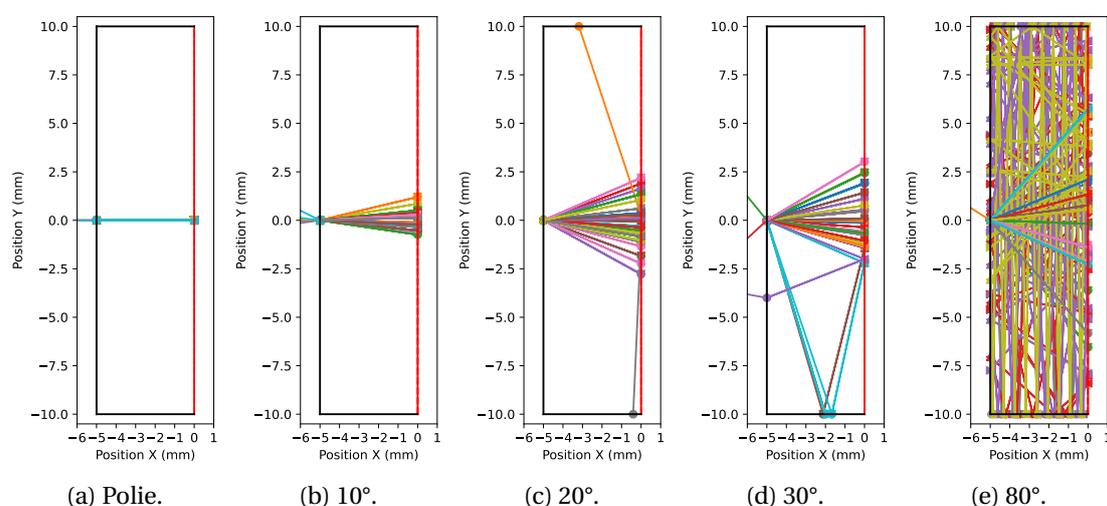


FIGURE 2.12 – Schéma représentant le détecteur (cristal de PWO passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par une couche mince d' Al_2O_3 de 100 nm d'épaisseur, suivi d'une photocathode d'après le modèle de Harmer *et al.*) et les trajectoires de 30 photons générés à l'entrée du cristal avec une longueur d'onde de 500 nm et une incidence normale. Lors de ces simulations, on considère une atténuation nulle du cristal afin de pouvoir analyser complètement la trajectoire des photons. Pour chaque figure, la rugosité des faces d'entrée et de sortie du cristal varie entre (a) Poli, (b) $\Sigma\alpha$ de 10° , (c) $\Sigma\alpha$ de 20° , (d) $\Sigma\alpha$ de 30° et (e) $\Sigma\alpha$ de 80° .

Un détecteur réel possède souvent des faces présentant une certaine rugosité. Avec Geant4, cette rugosité est définie en faisant varier la direction de la normale à la facette constituant l'interface rencontrée par le photon. Ainsi, un photon d'incidence normale à la surface du cristal, peut présenter un angle d'incident oblique à l'interface.

Lorsque l'utilisateur construit son détecteur, il a la possibilité d'affecter à chaque surface une *finition rugueuse* (`SetFinished(ground)`), associée à un angle $\Sigma\alpha$ (en radian) correspondant à l'écart-type de la distribution gaussienne de moyenne nulle de l'angle entre les normales au plan d'interface et à la facette.

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

Dans cette étude, les rugosités ont été définies en degrés et la variation de cet angle a été limitée au plan d'incidence (la facette ne tourne pas autour de l'axe Z).

Les trajectoires des photons en fonction de la rugosité des surfaces d'entrée et de sortie du cristal sont représentées sur la Figure 2.12. Les autres surfaces du cristal sont supposées polies pour simplifier l'étude. Sur cette Figure, nous observons l'évolution de l'angle de réfraction dans le cristal de PWO en fonction de la rugosité. Cet angle dépendant directement de l'angle d'incidence sur la facette, et donc de la direction de la normale à la facette, il nous est possible d'observer l'évolution de l'orientation de la facette en fonction de la rugosité. Ainsi, la Figure 2.12a nous permet de confirmer que pour une rugosité de 0°, la normale à la facette ne varie pas. L'angle de réfraction est donc nulle tout comme l'angle d'incidence. Pour des rugosités plus élevées, l'éventail des angles de réfraction possibles s'élargit, et la probabilité de réflexion sur les surfaces du cristal augmente. La transmittance totale de l'air à la photocathode en passant par le cristal est donc amenée à diminuer avec l'augmentation de la rugosité. Il est important de noter que pour une rugosité de 80°, le nombre de réflexions devient particulièrement important.

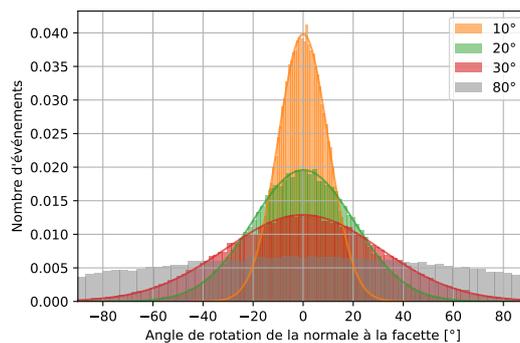


FIGURE 2.13 – Distribution angulaire normalisée de la normale à la facette selon la rugosité de la surface.

	Moyenne	Ecart-type
10°	0.02 ± 0.03	10.02 ± 0.022
20°	0.06 ± 0.06	20.38 ± 0.046
30°	-0.06 ± 0.10	30.95 ± 0.069

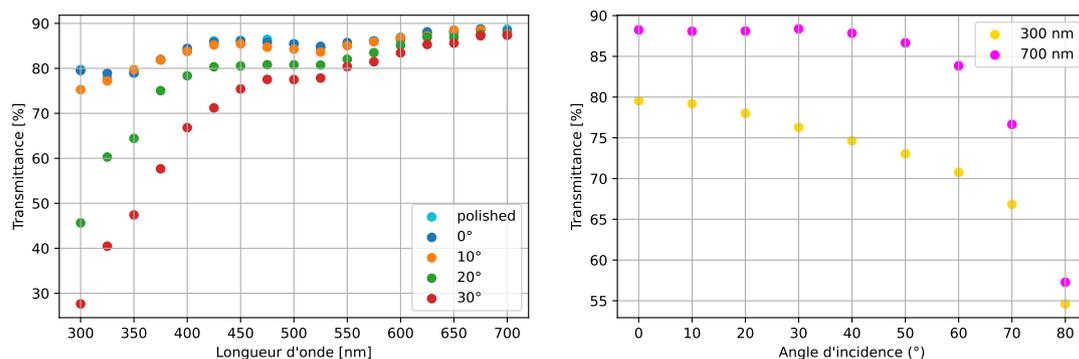
Tableau 2.1 – Statistique des distributions de la normale à la facette selon la rugosité de la surface.

Il a été jugé intéressant de vérifier la distribution angulaire de la normale à la facette pour ces différentes rugosités. Quatre simulations similaires ont donc été menées : 100 000 photons ont été générés à l'entrée du cristal avec une direction

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.3 Étude de la transmittance en fonction de différents paramètres et validation de la simulation Monte Carlo

d'incidence normale à la surface. Au passage de l'interface air/cristal, la direction de la normale à la facette est relevée et l'angle entre cette nouvelle direction et la direction initiale est calculé. Pour chaque rugosité étudiée, nous obtenons les distributions présentées sur la Figure 2.13 et les statistiques sont répertoriés dans la Table 2.1. Les histogrammes sont normalisés de sorte à ce que l'intégrale sous l'histogramme soit égale à 1. La moyenne et l'écart-type sont estimés par un fit gaussien de chaque histogramme, également représenté en trait continu sur la Figure 2.13.

On observe à partir des Figures 2.13 et la Table 2.1 que les moyennes des distributions sont bien centrées en zéro et que plus la rugosité est élevée et plus l'écart-type est grande. Dans le cas d'une rugosité de 80° , les valeurs de l'angle de la normale à la facette étant définis seulement entre -90° et 90° , la distribution est tronquée et n'a pas été *fitée*. Ceci justifie que les rugosités supérieures à 30° ne seront pas étudiées, car la probabilité que la normale à la facette ait un angle proche de 90° avec la normale initiale (soit une direction parallèle à la direction du photon) est trop important, ce qui n'a pas de cohérence physique.



(a) Transmittance en fonction de la longueur d'onde pour différentes rugosités. (b) Transmittance en fonction de l'angle d'incidence pour des faces d'entrée et de sortie du cristal polies.

FIGURE 2.14 – Transmittance déduite après simulation Monte Carlo de photons non-polarisés sur un cristal passivé par une couche mince d' Al_2O_3 de 100 nm d'épaisseur et suivi d'une photocathode bialcaline (a) en fonction de la longueur d'onde, pour une incidence normale et pour différentes rugosités des faces d'entrée et de sortie du cristal et (b) en fonction de l'angle d'incidence pour des faces du cristal polies et pour des longueurs d'onde de 300 et 700 nm.

La transmittance à travers un cristal a été simulée pour des faces d'entrée et de sortie ayant une rugosité de 0° , 10° , 20° et 30° . Les résultats en fonction de la longueur d'onde sont présentés sur la Figure 2.14a. Les courbes croissantes en fonction de la longueur d'onde nous permettent de constater plusieurs points :

1. Les transmittances pour une rugosité 0° et pour *polished* sont égales. Ceci prouve que la distribution angulaire de la normale à la facette pour une rugosité nulle

est identique à celle d'une surface polie.

2. Plus la rugosité est élevée et plus la transmittance est faible. En effet, la rugosité induit un angle d'incidence oblique à l'interface air/cristal. La Figure 2.14b montre que, pour les longueurs d'onde de 300 nm et 700 nm, la transmittance diminue avec l'angle d'incidence.
3. Les faibles longueurs d'onde sont plus impactées par la rugosité. Ceci est également mis en avant dans la Figure 2.14b, qui montre pour les longueurs d'onde à 300 nm et 700 nm l'évolution de la transmittance en fonction de l'angle d'incidence des photons sur la face d'entrée du cristal. Dans cette figure, la transmittance pour une longueur d'onde de 300 nm diminue bien plus rapidement que pour une longueur d'onde de 700 nm. Ceci est dû à l'indice de réfraction de la photocathode qui augmente avec la longueur d'onde, ce qui permet de minimiser la réflexion totale aux grands angles.

Cette étude nous a permis de mettre en avant l'importance de la rugosité d'une surface dans la transmittance d'un photon.

Dans le cadre du projet ClearMind, Follin *et al.* [M. FOLLIN, SHARYY, BARD *et al.* 2021] détaillent les propriétés de scintillation d'un cristal de PWO suite à une interaction gamma au sein du cristal. Ils constatent que la distribution du temps de collection est fortement impactée par la rugosité de la surface du cristal de PWO. Il devient alors nécessaire de quantifier cette rugosité. Une imagerie est faite sur les échantillons de PWO produits par CRYTUR, spol. s.r.o. (Turnov, République Tchèque) grâce à un microscope confocal de Orsay Panama. Les profondeurs mesurées sont converties en table de correspondances ou LUT (pour *Look Up Table*), permettant ainsi une simulation précise sur le logiciel Geant4, grâce à la prise en compte de la diffusion sur la surface rugueuse. La distribution du temps de collection calculée à l'aide du logiciel UC Davis [RONCALI *et* CHERRY 2013] et de la carte de rugosité, mesurée sur le cristal produit par CRYTUR suit parfaitement la distribution temporelle calculée à l'aide du modèle Unified [AGOSTINELLI, ALLISON, AMAKO *et al.* 2003] avec $\text{SigmaAlpha} = 20^\circ$ [M. FOLLIN, SHARYY, BARD *et al.* 2021]. Pour cette raison dans la suite de ce chapitre nous assumerons une rugosité de 20° pour les faces d'entrée et de sortie du cristal.

2.4 Estimation de l'absorbance d'une photocathode

2.4.1 Définition de l'absorbance

L'absorbance est une valeur sans dimension que nous définissons comme étant la quantité de photons absorbés par la photocathode, par rapport au nombre de photons total générés.

Dans l'expérience présentée dans leur article Motta et Schönert [MOTTA *et* SCHÖNERT 2005] définissent cette grandeur de la manière suivante :

$$A(\lambda, \theta) = 1 - R(\lambda, \theta) - T(\lambda, \theta) \quad (2.12)$$

avec $T(\lambda, \theta)$ la transmittance totale à travers la couche photo-électrique, c'est-à-dire la transmittance à travers les interfaces air/cristal/PC/air, et $R(\lambda, \theta)$ la réflectance à l'entrée de la photocathode.

Dans notre étude, nous calculons l'absorbance comme le produit de la transmittance totale des photons de l'air vers la photocathode $T_{air/PC}$ et de la probabilité d'atténuation par la photocathode P_{att} . Ainsi, nous notons $A(\lambda, \theta)$ l'absorbance telle que :

$$A(\lambda, \theta) = T_{air/PC} P_{att} \quad (2.13)$$

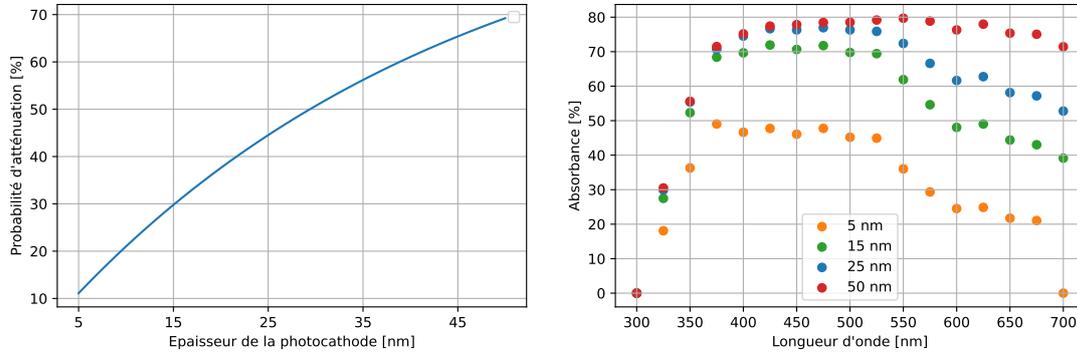
La probabilité d'atténuation P_{att} de la photocathode est définie à partir du coefficient d'extinction du matériau κ défini dans la Section 2.2.1.2.

2.4.2 Impact de différents paramètres sur la variation de l'absorbance en fonction de la longueur d'onde

L'absorbance est dépendante de paramètres multiples tels que les caractéristiques du photon (longueur d'onde, angle d'incidence), ou de la structure étudiée (rugosité des surfaces, épaisseurs des couches minces, indices de réfraction et longueur d'atténuation des différents milieux). Dans cette section, la structure générale étudiée reste inchangée à ce qui précède : un cristal de PWO de 5 mm d'épaisseur et 20 mm de diamètre, passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par une couche mince d' Al_2O_3 de 100 nm d'épaisseur. Une photocathode bialcaline de 25 nm d'épaisseur est déposée directement sur la face de sortie du cristal. Cinquante mille photons d'incidences normales sont générés à l'entrée du cristal. Pour un résultat le plus réaliste possible, nous prenons également en compte la longueur d'atténuation du cristal ainsi que la rugosité des surfaces d'entrée et de sortie.

La plupart des paramètres jouant sur la transmittance ayant déjà été étudiés dans les sections précédentes, nous étudions ici plus spécifiquement les paramètres ayant directement un impact sur l'absorbance de la photocathode : l'épaisseur de la photocathode et son modèle (bialcaline bleue (Harmer *et al.*, Motta et Schönert) ou S20).

2.4.2.1 Impact de l'épaisseur de la photocathode



(a) Probabilité d'atténuation des photons de 500 nm par la photocathode. (b) Absorbance en fonction de la longueur d'onde des photons pour différentes épaisseurs de photocathodes.

FIGURE 2.15 – (a) Probabilité d'atténuation des photons de 500 nm en fonction de l'épaisseur de la photocathode et (b) absorbance en fonction de la longueur d'onde des photons pour différentes épaisseurs de photocathodes décrites par le modèle de Harmer *et al.* [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG *et al.* 2006].

La Figure 2.15a nous montre la probabilité d'atténuation théorique d'un photon de 500 nm en fonction de l'épaisseur de photocathode. La probabilité d'atténuation est définie comme $P_{att} = 1 - a(\mu, x)$, avec $a = e^{-\mu(\lambda)x}$ donné par l'équation (2.5) en Section 2.2.1.2. Le coefficient d'extinction κ extrait de l'article de Harmer *et al.* [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG *et al.* 2006] permet de calculer le coefficient d'atténuation linéique μ grâce à l'équation (2.6). Nous obtenons ainsi une probabilité d'atténuation qui augmente logiquement avec l'épaisseur de la photocathode, le photon ayant plus de distance à parcourir dans le milieu.

La Figure 2.15b représente l'absorbance obtenue pour la simulation de 50 000 photons pour chaque longueur d'onde et pour différentes épaisseurs de la photocathode. L'épaisseur typique d'une photocathode bialcaline étant de 25 nm, nous avons choisi de simuler des épaisseurs de 5, 15, 25 et 50 nm. On observe une absorbance nulle pour les longueurs d'onde proche de 300 nm typique d'une simulation pour un cristal de PWO qui est très absorbant aux faibles longueurs d'onde.

En outre, il apparaît clairement que l'absorbance augmente avec l'épaisseur de la photocathode. Ceci est dû à l'augmentation de la probabilité d'atténuation. Il serait donc utile de déposer des photocathodes bien plus épaisses sur le cristal passivé afin de maximiser l'atténuation des photons arrivant sur la photocathode. Mais une photocathode trop épaisse ne permettrait pas au photoélectron créé de sortir de la couche pour être drainé vers la galette de microcanaux, et converti en signal électrique. Il est donc nécessaire de trouver une épaisseur de photocathode qui soit un bon

compromis entre absorption et probabilité d'extraction des photoélectrons [MOTTA et SCHÖNERT 2005].

Nous savons que l'absorbance est le produit de la transmittance totale $T_{air/PC}$ et de la probabilité d'atténuation P_{att} . Considérons une longueur d'onde de 500 nm et une épaisseur de la photocathode de 25 nm. D'après la Figure 2.14a, pour une rugosité de 20°, $T_{air/PC} = 81.6\%$ et $P_{att} = 44.5\%$, d'après la Figure 2.15a, ce qui donne une absorbance calculée de 36.3% alors que l'absorbance estimée par simulation est de 76.6%. Cette différence est due aux réflexions multiples qui peuvent avoir lieu dans la photocathode et qui sont prises en compte par la simulation Monte Carlo. Celles-ci augmentent la distance parcourue par le photon dans la photocathode, et donc sa probabilité d'atténuation. De plus, les faces d'entrée et de sortie du cristal ayant une rugosité de 20°, le photon ne pénètre pas dans la photocathode avec une incidence normale, mais généralement oblique. Cet argument est également en faveur d'un parcours dans la photocathode plus long que l'épaisseur de la photocathode. Admettons que de manière aléatoire le photon pénètre dans la photocathode avec un angle de 45°. Il ne traverse alors plus seulement 25 nm, mais 35 nm. De plus, il peut aussi subir une réflexion sur l'interface PC/vide et doubler ainsi la distance parcourue au sein de la photocathode. La probabilité d'absorption dans la photocathode pour une distance parcourue de 70 nm est alors de 80.8%. Ceci explique une absorbance simulée bien plus élevée que calculée, et très proche de la courbe de transmittance.

2.4.2.2 Selon le modèle de la photocathode

Dans ce paragraphe nous étudions les modèles de photocathodes décrits dans la Section 2.3.3.1.

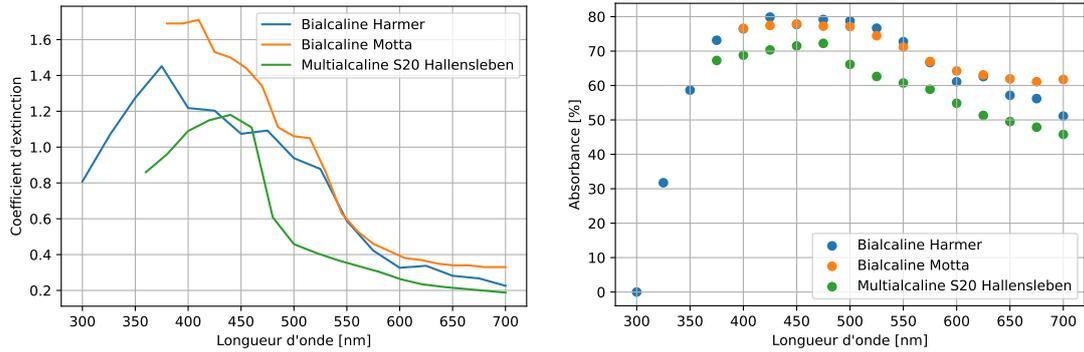
La Figure 2.16a montre l'évolution des coefficients d'extinction des trois modèles de photocathodes étudiés en fonction de la longueur d'onde. Plus le coefficient d'extinction est élevé et plus le milieu est atténuant. A une exception près autour de 450 nm, les photocathodes bialcalines étudiées dans ce travail ont un coefficient d'extinction supérieur à la photocathode multialcaline. La photocathode suivant le modèle de Motta et Schönert est la plus atténuante.

La Figure 2.16b montre les résultats d'absorbance suite au tirage de 50 000 photons pour chaque longueur d'onde.

Pour tous les modèles de photocathode, on observe un maximum d'absorbance pour les longueurs d'onde allant d'environ 400 à 500 nm. Cette observation, due à une transmittance $T_{air/PC}$ élevée (Figure 2.14a) et une probabilité d'atténuation P_{att} importante, est propice au développement du module de détection ClearMind qui utilise un cristal de PWO dont le maximum de rendement de scintillation est de 420 nm, c'est-à-dire compris entre ces bornes.

Pour toutes les longueurs d'onde, une absorbance maximale est obtenue pour des photocathodes bialcalines, ce qui laisse entendre que ce type de couche photoélectrique serait préférable pour la construction de détecteur.

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.4 Estimation de l'absorbance d'une photocathode



(a) Coefficient d'extinction en fonction de la longueur d'onde. (b) Absorbance de photons en fonction de la longueur d'onde.

FIGURE 2.16 – (a) Coefficient d'extinction en fonction de la longueur d'onde pour trois modèles de photocathodes et (b) Absorbance de photons non-polarisés en fonction de la longueur d'onde pour trois modèles de photocathodes. La structure étudiée est composée d'un cristal de PWO passivé par une couche mince d' Al_2O_3 de 100 nm d'épaisseur suivi de la photocathode.

2.4.3 Importance de la transmission frustrée

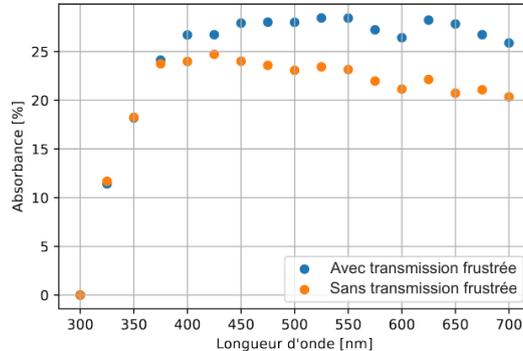


FIGURE 2.17 – Absorbance de photons non-polarisés en fonction de la longueur d'onde avec et sans transmission frustrée à travers une couche mince d' Al_2O_3 de 100 nm d'épaisseur.

Une des conséquences de la présence de la couche mince est la transmission frustrée. Comme vu précédemment, ce phénomène peut se produire à travers une couche mince si l'indice de réfraction de cette couche mince est à la fois inférieur à celui du milieu qui la précède (il existe donc un angle limite θ_L à l'interface entre le cristal de PWO et la couche mince) et inférieur à celui du milieu qui la suit. C'est le cas de l'interface PWO/PC du module de détection ClearMind. Pour les longueurs d'onde supérieures à 375 nm, nous avons $n_{CM} < n_{PWO}$ et $n_{CM} < n_{PC}$ avec n_{CM} , n_{PWO} et

2 Transmittance à travers une couche mince et simulation Monte Carlo d'une interface optique constituée d'une couche mince – 2.4 Estimation de l'absorbance d'une photocathode

n_{PC} les indices de réfraction de la couche mince, du cristal et de la photocathode, respectivement.

Ainsi, nous nous sommes demandé l'importance de la transmission frustrée dans l'estimation de l'absorbance de la photocathode du module de détection ClearMind.

Pour ce faire, 10 000 photons ont été générés de manière isotrope, depuis une source ponctuelle située au centre du cristal de PWO. Grâce au nouveau paramètre `frustrated` de la classe `G4OpBoundaryProcess`, deux simulations ont été menées : l'une avec `frustrated = 1` (courbe bleue sur la Figure 2.17), dans ce cas la transmission frustrée est modélisée à l'interface PWO/PC, l'autre avec `frustrated = 0` (courbe orange sur la Figure 2.17), dans ce cas les photons subiront simplement une réflexion totale pour les angles d'incidence supérieur à θ_L sur le plan d'interface.

La Figure 2.17 montre les résultats de ces deux simulations. L'absorbance est beaucoup plus faible que dans les simulations précédentes car les photons sont émis de manière isotrope au centre du cristal, et non pas en direction de la photocathode. On observe que les longueurs d'onde inférieures à 375 nm ne sont pas impactées par le changement de paramètre `frustrated` car elles ne respectent pas la condition $n_{CM} < n_{PC}$ (Figure 2.1). En revanche, au delà de cette valeur de longueur d'onde, il apparaît très clairement une transmittance plus élevée lorsque la transmission frustrée est prise en compte. A 500 nm, cette augmentation va jusqu'à 5% en absolu, et environ 25 % en relatif.

La transmission frustrée joue donc un rôle significatif au sein du module de détection ClearMind en induisant une absorbance plus élevée, et donc un signal de sortie plus important et plus facilement exploitable.

Les différentes études menées nous ont permis d'avoir une meilleure appréhension des résultats de transmittance et d'absorbance à l'oeuvre dans un module similaire à celui du projet ClearMind. La comparaison entre les résultats théoriques et simulés nous assure une validation de l'implémentation de la méthode `CoatedDielectricDielectric()`, gérant les interactions des photons à travers une interface composée d'une couche mince.

Une comparaison entre les résultats de la simulation et des résultats expérimentaux obtenus sur le site du CEA à Saclay peuvent être utiles pour valider le modèle Monte Carlo et estimer les constantes optiques des matériaux utilisés et l'épaisseur de la couche mince.

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince

Sommaire

3.1	Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.	89
3.1.1	Détermination de l'indice de réfraction du PWO par l'équation de Sellmeier	89
3.1.2	Détermination de la longueur d'atténuation du PWO	93
3.1.3	Validation de l'implémentation du phénomène d'interférences à travers une couche mince dans Geant4	96
3.2	Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.	97
3.2.1	Présentation des paramètres de l'expérience.	98
3.2.1.1	Description des cellules tests	98
3.2.1.2	Efficacité de détection ou PDE	99
3.2.1.3	Banc de mesure	100
3.2.2	Analyse des résultats	102
3.2.2.1	Le flux	102
3.2.2.2	Sensibilité et PDE des cellules tests	103
3.2.2.3	Détermination de l'efficacité quantique des photocathodes	104
3.2.2.4	Détermination de la probabilité d'extraction des photocathodes	105

La comparaison entre la transmittance théorique et celle obtenue à partir de la simulation Monte Carlo dans le chapitre précédent nous a permis de vérifier la justesse de l'implémentation du modèle dans le logiciel Geant4. Ce chapitre est axé sur les résultats expérimentaux et leur comparaison avec les résultats obtenus analytiquement et par simulation Monte Carlo. La première partie de ce chapitre est centrée sur la transmittance à travers un cristal nu poli et à travers quatre cristaux polis et passivés sur leurs faces d'entrée et de sortie par des couches minces : deux par des

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.1 Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.

couches minces d'oxyde d'aluminium et deux autres par des couches minces d'oxyde de titane. Les transmittances théoriques seront comparées aux mesures. La deuxième partie de ce chapitre consiste à étudier l'efficacité de détection (PDE) de cellules tests caractérisées à l'Irfu du CEA-Saclay. Ces dernières sont constituées soit d'un cristal de PWO poli et passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par une couche mince de 100 nm dont la composition est protégée par un accord de confidentialité, soit d'un cristal de quartz (SiO_2), sur lesquels a été déposée en face de sortie une photocathode.

3.1 Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.

La comparaison entre la transmittance simulée et mesurée permet de déterminer les caractéristiques du cristal tels que son indice de réfraction et sa longueur d'atténuation en fonction de la longueur d'onde, ainsi que l'épaisseur des couches minces déposées sur ses faces d'entrée et de sortie. Nous avons utilisé la fonction *lmfit* de la librairie du langage de programmation Python pour ajuster les paramètres de la transmittance théorique aux résultats expérimentaux. Cette fonction est basée par défaut sur l'algorithme de Levenberg-Marquardt, qui permet de minimiser le tableau résiduel obtenu par une fonction *objective* résultant de la comparaison entre les données théoriques et expérimentales. Dans cette première partie, deux ajustements ou *fits* sont effectués. Le premier est appliqué aux longueurs d'onde supérieures à 400 nm afin de s'affranchir du phénomène d'atténuation dans le PWO, qui est négligeable pour les longueurs d'onde supérieures à 400 nm. Le second est effectué pour des longueurs d'onde supérieures à 300 nm et exploite le résultat du premier *fit* en y incluant l'atténuation dans le cristal.

3.1.1 Détermination de l'indice de réfraction du PWO par l'équation de Sellmeier

Dans le but de déterminer l'indice de réfraction des cristaux de PWO utilisés lors des mesures, nous nous référons à l'article de Huang et Seo [HUANG et SEO 2007] dans lequel les coefficients de Sellmeier permettent d'exprimer l'indice de réfraction du PWO en fonction de la longueur d'onde à partir de la paramétrisation de Sellmeier :

$$n^2 = A + \frac{B}{\lambda^2 - C} - D\lambda^2 \quad (3.1)$$

où A , B , C et D sont les coefficients de Sellmeier (avec A sans unité, B et C en μm^2 et D en μm^{-2}) et λ est la longueur d'onde exprimée en μm . La Figure 2.8 représente les indices de réfraction ordinaires et extraordinaires mesurés par Chipaux [CHIPAUX 1995] et de Huang et Seo [HUANG et SEO 2007] en fonction de la longueur d'onde et les coefficients de Sellmeier correspondants sont présentés dans la Table 3.1.

La transmittance théorique est donnée par l'Eq 2.4, où $T = 1 - R$ et $R = rr^*$, avec

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.1 Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.

	Ref Huang et Seo		Ref Baccaro/Chipaux	
	n_o	n_e	n_o	n_e
A	4.66274	4.52794	4.740	3.671
B	0.13932	0.07718	0.090	0.079
C	0.04592	0.05931	0.073	0.074
D	-0.06248	0.10762	$1.410 \cdot 10^{-7}$	-0.006

Tableau 3.1 – Coefficients de Sellmeier correspondants aux indices de réfraction ordinaires et extraordinaires obtenus Huang et Seo [HUANG et SEO 2007] et Bacacro *et al.* [BACCARO, L M BARONE, BORGIA et al. 1995]. Les courbes d'indices de réfractons obtenus par les auteurs sont illustrées sur la Figure 2.8. Les coefficients de Sellmeier dans le cas de Baccaro/Chipaux ont été obtenus par un ajustement de la formule de Chipaux à la formule de Huang et Seo (Eq 3.1). A est sans unité, B et C en μm^2 et D en μm^{-2} .

r calculé à partir de l'Eq 1.35, et r^* son conjugué complexe. L'indice de réfraction du PWO est calculé à partir de l'équation 3.1. Les indices de réfraction de l'oxyde d'aluminium et de l'oxyde de titane sont représentés en fonction de la longueur d'onde dans la Figure 2.1.

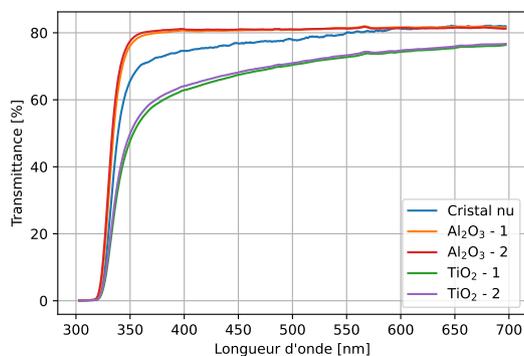


FIGURE 3.1 – Mesures de transmittance d'un cristal de PWO nu (sans couche mince), de deux cristaux passivés sur leurs faces d'entrée et de sortie par des couches minces d'oxyde d'aluminium (Al_2O_3 - 1 et 2) et de deux cristaux passivés par des couches minces d'oxyde de titane (TiO_2 - 1 et 2).

Les mesures de transmittance ont été réalisées par Photek, Ltd. à travers un cristal de PWO nu (sans couche mince), deux cristaux passivés sur leurs faces d'entrée et de sortie par des couches minces d'oxyde d'aluminium et deux cristaux passivés par des couches minces d'oxyde de titane (Figure 3.1). Les cristaux ont une épaisseur de 5 mm. Les couches minces ont été déposées puis durcies à l'Irfu du CEA-Saclay et ont des épaisseurs estimées à environ 18 nm dans le cas des couches de passivation

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince –
 3.1 Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.

d'oxyde d'aluminium et de 55 nm dans le cas des couches de passivation d'oxyde de titane. Une délamination de la couche de passivation d'oxyde de titane est cependant observée, ce qui laisse à penser que l'épaisseur réelle est plus faible. Les cinq cristaux de PWO ont été produits par CRYTUR, spol. s r.o. (Turnov, République Tchèque) et nous supposons qu'ils ont les mêmes caractéristiques (même indice de réfraction et même longueur d'atténuation en fonction de la longueur d'onde). C'est pourquoi nous ajustons l'ensemble des cinq mesures simultanément pour trouver les coefficients de Sellmeier permettant de paramétriser l'indice de réfraction des cristaux de PWO. Les épaisseurs des couches minces sont également ajustées par *lmfit*.

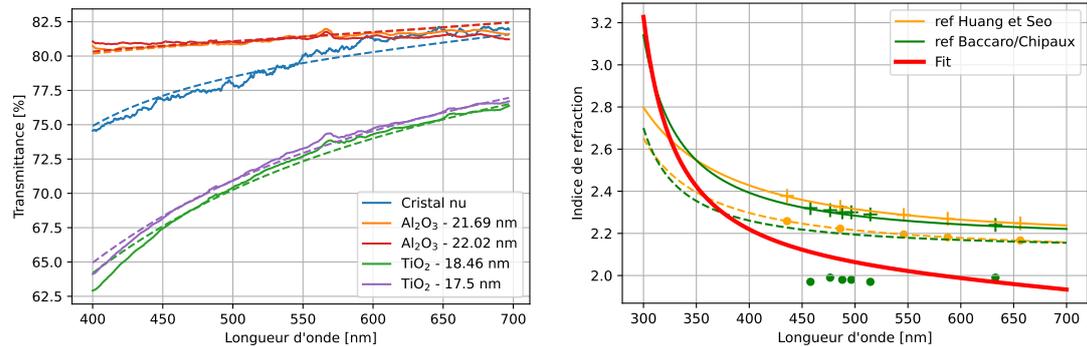
		Premier <i>fit</i>	Deuxième <i>fit</i>
Coefficients de Sellmeier	A	3.900 ± (1.13 %)	-
	B	0.098 ± (18.47 %)	-
	C	0.075 ± (13.90 %)	0.026 ± (8.64 %)
	D	0.813 ± (18.70 %)	-
Épaisseurs des couches minces (en nm)	Al ₂ O ₃ - 1	21.69 ± 0.10	26.23 ± 0.19
	Al ₂ O ₃ - 2	22.02 ± 0.19	27.79 ± 0.19
	TiO ₂ - 1	18.46 ± 0.03	17.86 ± 0.07
	TiO ₂ - 2	17.50 ± 0.03	16.70 ± 0.07
χ^2_v		1.83 × 10 ⁻⁵	1.63 × 10 ⁻⁴

Tableau 3.2 – Résultats du premier *fit* sur les longueurs d'onde supérieures à 400 nm (Section 3.1.1) et du second *fit* effectué à partir de 300 nm et qui prend en compte l'atténuation dans le PWO (Section 3.1.2). *A* est sans unité, *B* et *C* en μm^2 , et *D* en μm^{-2} . Le χ^2_v est le χ^2 réduit.

Le premier *fit* se fait à partir de 400 nm pour s'affranchir de l'absorption par le PWO (Figure 3.2a). On obtient les coefficients de Sellmeier et les épaisseurs des couches minces présentés dans la première colonne de la Table 3.2. Les épaisseurs obtenues pour chaque couche mince sont environ 22 nm pour les couches minces d'oxyde d'aluminium et 18 nm pour les couches minces d'oxyde de titane.

L'indice de réfraction obtenu en fonction de la longueur d'onde est présenté sur la Figure 3.2b. Pour les longueurs d'onde aux alentours de 300 nm, il est proche de l'indice de réfraction ordinaire extrait de l'article de Chipaux [CHIPAUX 1995]. En revanche, pour les longueurs d'onde supérieures, l'indice de réfraction diminue jusqu'à environ 2.0, ce qui correspond à l'indice de réfraction extraordinaire donné par Chipaux. Ces mesures sont questionnées par les auteurs, en raison des surfaces opposées du cristal qui ne sont pas parfaitement parallèles. Ceci engendre une déviation du faisceau et une erreur de mesure, ce qui peut expliquer un indice de réfraction mesuré éloigné de

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.1 Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.



- (a) Transmittances mesurées (trait continu) et transmittances *fittées* (traitillé) en fonction de la longueur d'onde pour les différents cas étudiés.
- (b) Indice de réfraction obtenu à partir des coefficients de Sellmeier ajustés lors du premier *fit* pour des longueurs d'onde supérieures à 400 nm et indices ordinaire (trait continu) et extraordinaire (traitillés) des valeurs données dans la littérature.

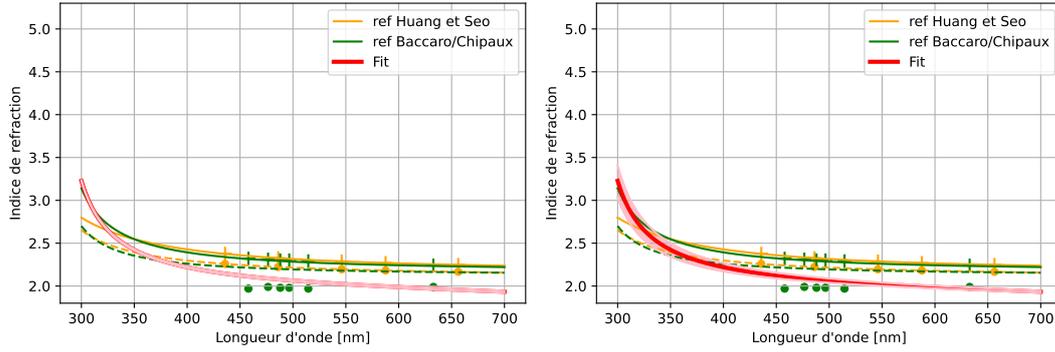
FIGURE 3.2 – (a) Transmittances théoriques et (b) indice de réfraction du PWO ajusté lors du premier *fit*.

ceux trouvés dans la littérature.

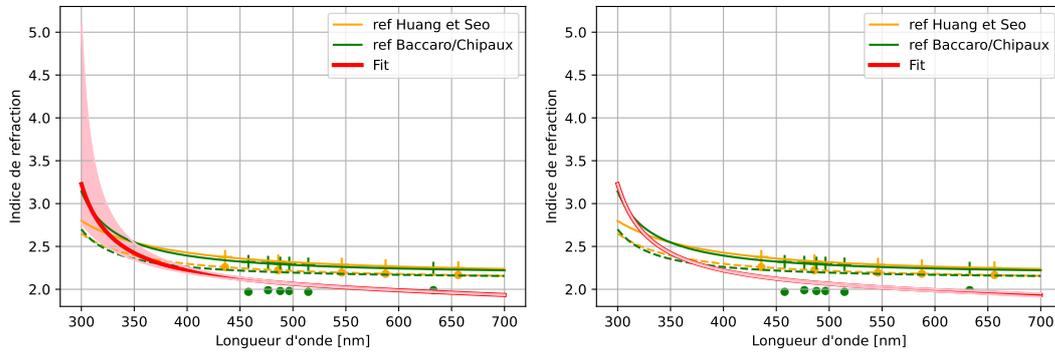
L'impact de chaque coefficient de Sellmeier sur l'indice de réfraction du PWO a été étudié, et les résultats sont présentés sur la Figure 3.3. On constate que les coefficients *A* et *D* régissent l'indice de réfraction aux longueurs d'onde élevées, tandis que *B* et *C* l'influencent aux faibles longueurs d'onde. Notons que l'impact des coefficients *A*, *B* et *D* est négligeable comparé à celui provoqué par la variation de *C* en dessous de 400 nm où il n'a pas été ajusté.

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince –

3.1 Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.



(a) Variation du coefficient A entre $[-\sigma_A; +\sigma_A]$. (b) Variation du coefficient B entre $[-\sigma_B; +\sigma_B]$.



(c) Variation du coefficient C entre $[-\sigma_C; +\sigma_C]$. (d) Variation du coefficient D entre $[-\sigma_D; +\sigma_D]$.

FIGURE 3.3 – Variation de l'indice de réfraction en fonction de l'écart-type de l'ajustement des coefficients de Sellmeier (a) A , (b) B , (c) C et (d) D . La courbe épaisse rouge correspond à l'indice de réfraction moyen obtenu par le *fit*. La variation de cet indice de réfraction causé par la variation de plus ou moins un écart-type pour chaque coefficient de Sellmeier est représentée par la zone rouge clair.

3.1.2 Détermination de la longueur d'atténuation du PWO

L'atténuation du PWO a été étudiée par de nombreux auteurs [ANNENKOV, KORZHIK et LECOQ 2002], [S. BACCARO, L. M. BARONE, B. BORGIA et al. 1997], [DELICE, ISIK et GASANLY 2022], [AKCHURIN, BEDESCHI, CARDINI et al. 2009]. Sa longueur d'atténuation est inférieure à 1 mm jusqu'à environ 320 nm, et supérieure à 1.10^3 mm au delà de 400 nm.

La *longueur d'atténuation* (ou *Light Attenuation Length*) (LAL) peut-être exprimée à partir du rapport entre la transmittance théorique T_s et la transmittance mesurée T [MA et R.-y. ZHU 1993] :

$$LAL = \frac{l}{\ln\left(\frac{T_s}{T}\right)} \quad (3.2)$$

avec l la longueur du cristal. Dans ce cas T_s est la transmittance théorique calculée

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.1 Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.

comme précédemment, c'est-à-dire sans tenir compte de l'atténuation par le PWO.

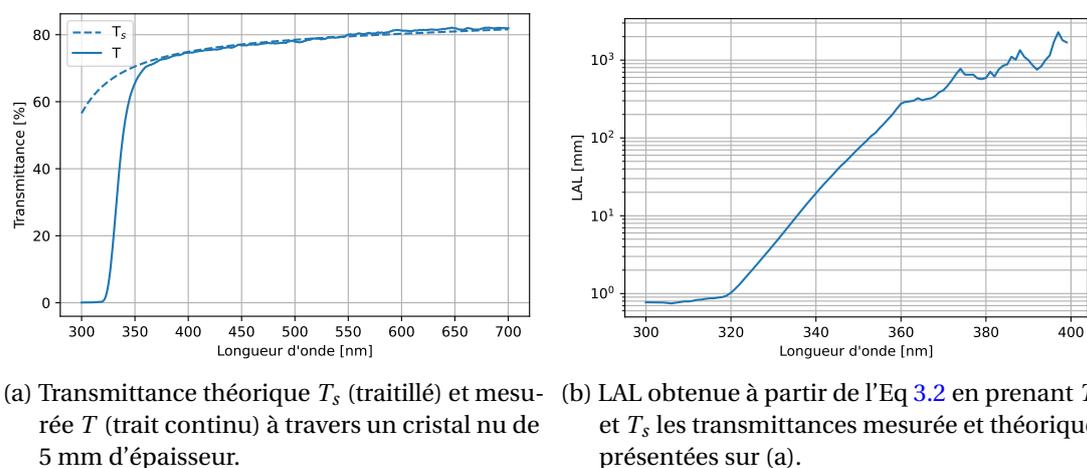


FIGURE 3.4 – (a) Comparaison des transmittances théorique T_s et mesurée T et (b) détermination de longueur d'atténuation en fonction de la longueur d'onde dans le cas d'un cristal nu de PWO de 5 mm d'épaisseur.

En prenant pour indice de réfraction du PWO les valeurs résultant du premier ajustement, nous calculons la transmittance théorique T_s à travers un cristal nu pour des longueur d'onde comprises entre 300 à 700 nm. La Figure 3.4a montre la différence entre la transmittance théorique T_s et la transmittance mesurée T à travers le cristal nu, causée par l'atténuation de la lumière par le PWO pour les longueur d'onde inférieures à 400 nm. En appliquant l'Eq 3.2, de 300 à 700 nm, nous obtenons la longueur d'atténuation présente sur la Figure 3.4b. A 300 nm, la longueur d'atténuation de notre cristal est de l'ordre de 0.8 mm. Pour un cristal de 5 mm d'épaisseur, l'atténuation devient négligeable à partir de 400 nm. Les oscillations de la longueur d'atténuation visibles entre 360 et 400 nm sont dues aux erreurs de mesure.

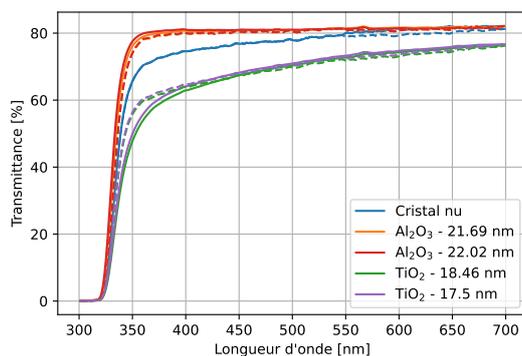


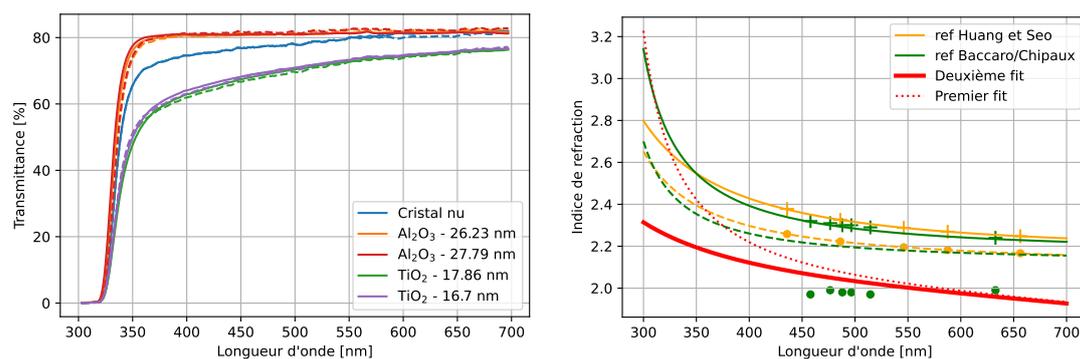
FIGURE 3.5 – Transmittances théoriques (traitillé) résultant du premier *fit* pour les longueurs d'onde supérieures à 400 nm et de la longueur d'atténuation du PWO, comparées aux transmittances mesurées (trait continu) à travers un cristal nu de 5 mm d'épaisseur.

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince –

3.1 Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.

En appliquant le phénomène d'atténuation au cas des cristaux passivés par les couches minces d'oxyde d'aluminium et d'oxyde de titane, nous obtenons les transmittances théoriques présentées sur la Figure 3.5. Entre 330 et 400 nm, la concordance entre les transmittances mesurées et les transmittances théoriques n'est pas bonne, en particulier pour les cristaux passivés par des couches minces d'oxyde de titane.

Comme nous l'avons vu précédemment, le coefficient de Sellmeier C influe largement la valeur de l'indice de réfraction du PWO pour les longueurs d'onde inférieures à 400 nm. C'est pourquoi un second *fit* a été effectué, entre 300 à 700 nm afin d'affiner l'estimation du coefficient de Sellmeier C (les coefficients A , B et D restant fixés à ceux obtenus lors du premier *fit*), tout en laissant libre les épaisseurs des couches minces et la longueur d'atténuation. Les valeurs obtenues et leur incertitudes sont listées dans la Table 3.2 et les transmittances calculées ainsi que l'indice de réfraction et la longueur d'atténuation résultant de ce nouvel ajustement du coefficient de Sellmeier C sont tracés sur la Figure 3.6 et 3.7. On observe que le χ^2_v du second *fit* est plus important que celui obtenu par le premier *fit*, dû à la prise en compte de l'atténuation du PWO, difficile à ajuster. Celui-ci reste néanmoins inférieur à 1, ce qui nous permet de valider la correspondance entre les transmittances mesurées et théoriques.



(a) Transmittances mesurées (trait continu) et calculées à partir du second *fit* (traitillé) en fonction de la longueur d'onde pour les différents cas étudiés. (b) Indice de réfraction obtenu à partir des coefficients de Sellmeier trouvés lors du second *fit*. En pointillés, l'indice de réfraction résultant du premier *fit*.

FIGURE 3.6 – (a) Transmittances théoriques et (b) indice de réfraction du PWO déduits du deuxième *fit*.

On constate sur la Figure 3.6a que la concordance entre les transmittances mesurées et calculées à partir des données du second *fit* est bien meilleure qu'après le premier *fit* pour les longueurs d'onde inférieures à 400 nm.

L'indice de réfraction correspondant reste plus faible que les indices trouvés dans la littérature (Figure 3.6b) et se rapproche de l'indice extraordinaire de Chipaux [CHIPAUX 1995]. Cela pourrait peut-être s'expliquer si les faces du cristal n'étaient pas parfaitement parallèles, ce qui n'a pas été vérifié expérimentalement.

En tous les cas, le décalage de notre indice de réfraction par rapport aux valeurs trouvées dans la littérature ne peut pas être expliqué par la rugosité des faces, car elle

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.1 Comparaison de la transmittance simulée et mesurée de cristaux PWO nu et passivé.

n'influe que très peu aux longueurs d'onde élevées (Figure 2.14a). La diversité des valeurs d'indice de réfraction trouvées dans la littérature pour ce cristal biréfringent illustre cependant la difficulté de cette mesure.

Une autre hypothèse est l'orientation de l'axe optique du cristal. Si nous supposons que l'axe optique est oblique par rapport au plan d'interface, alors le rayon extraordinaire est dévié du rayon ordinaire [BUCHWALD 2007], ce qui rend la mesure de transmittance du rayon extraordinaire plus difficile.

La longueur d'atténuation recalculée à partir des valeurs de Sellmeier déterminée par le second ajustement est représentée en fonction de la longueur d'onde sur la Figure 3.7. On constate que pour les longueurs d'onde au delà de 340 nm, l'atténuation est plus importante que celle déterminée suite au premier ajustement.

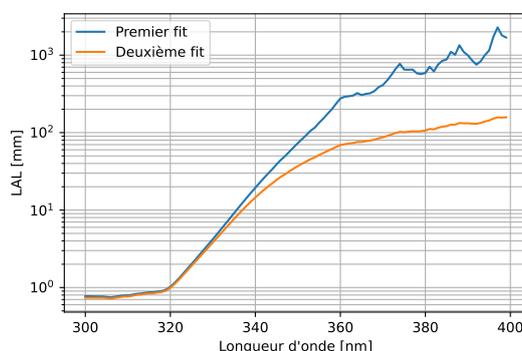


FIGURE 3.7 – Longueur d'atténuation en fonction de la longueur d'onde obtenue à partir du rapport entre la transmittance théorique calculée sans prendre en compte l'atténuation du cristal, et pour des coefficients de Sellmeier déduits du deuxième ajustement, et la transmittance mesurée.

3.1.3 Validation de l'implémentation du phénomène d'interférences à travers une couche mince dans Geant4

Les propriétés du PWO extraites du second *fit* nous permettent d'estimer la transmittance à partir de la simulation Monte Carlo des cellules tests. Celle-ci est déterminée en tirant 50 000 photons à travers un cristal soit nu, soit passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par des couches minces d'oxyde d'aluminium ou d'oxyde de titane d'épaisseur donnée dans la Table 3.2. Les épaisseurs des cristaux sont de 5 mm et l'indice de réfraction utilisé pour le PWO est celui calculé à partir des coefficients A , B , C et D déduits du second *fit* (Figure 3.6b et Table 3.2). Enfin, la longueur d'atténuation du PWO est celle calculée à partir de l'équation 3.2 (Figure 3.4b).

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.2 Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.

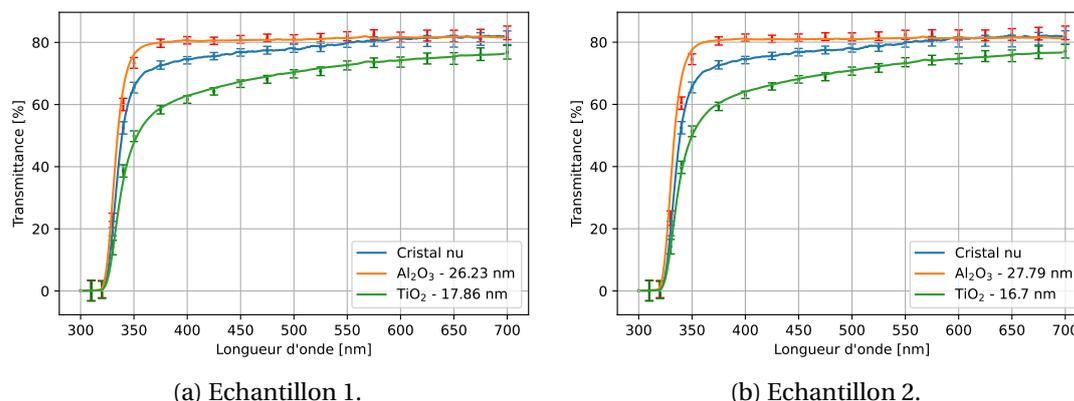


FIGURE 3.8 – Transmittances mesurées en fonction de la longueur d'onde (trait) et estimée d'après la simulation Monte Carlo (marqueurs) de 50 000 photons non-polarisés normalement sur la face avant d'un cristal de PWO nu (en bleu), passivé par des couches minces d'oxyde d'aluminium (en orange) et par des couches minces d'oxyde de titane (en vert). L'indice de réfraction et la longueur d'absorption utilisés sont ceux déduits de la Section 3.1.2. L'épaisseur des cristaux de PWO est de 5 mm. Pour faciliter la lecture graphique avec les barres d'erreur, les deux échantillons sont séparés sur deux figures différentes avec (a) l'échantillon 1 et (b) l'échantillon 2.

Les transmittances obtenues par la simulation correspondent bien aux transmittances expérimentales. Nous négligeons l'incertitude sur l'épaisseur des couches minces, ainsi que l'incertitude statistique due à la simulation Monte Carlo, par rapport aux incertitudes sur les coefficients de Sellmeier (Eq 3.1 et Table 3.2).

3.2 Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.

Dans cette partie, nous étudions les caractéristiques de photocathodes bialcalines grâce à la mesure de l'efficacité de détection d'un photon (ou *Photon Detection Efficiency*) (PDE) de deux cellules tests. La PDE représente la probabilité pour un photon d'être transmis à la photocathode et converti en un photoélectron suite à son absorption dans la photocathode et à l'extraction effective du photoélectron généré. La forte délamination observée sur la couche de passivation d'oxyde de titane ne permet pas des mesures de PDE. Une photocathode bialcaline a été déposée sur un cristal de PWO passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par des couches minces d'oxyde d'aluminium de 100 nm d'épaisseurs. La PDE mesurée sera comparée à celle mesurée à travers une cellule test de contrôle composée d'un cristal de SiO₂, sur lequel une photocathode similaire a été directement déposée.

3.2.1 Présentation des paramètres de l'expérience.

3.2.1.1 Description des cellules tests



FIGURE 3.9 – Photographie des cellules tests. A gauche la cellule test de contrôle (SiO_2) et à droite la cellule test de mesure (PWO).

Les deux cellules tests utilisées (Figure 3.9 et 3.10) ont été réalisées simultanément par Photek, Ltd. et sont composées d'un cristal de 5 mm d'épaisseur et de 20 mm de diamètre, sur lequel a été directement déposée une photocathode de 25 nm d'épaisseur. Dans le cas de la cellule test de mesure (Figure 3.10b), le cristal de PWO est passivé sur ses faces d'entrée et de sortie par des couches minces de 100 nm d'épaisseur déposées par Photek, Ltd, dont la composition est couverte par un accord de confidentialité. Dans le cas de la cellule test de contrôle (Figure 3.10a), le cristal de quartz (SiO_2) non-passivé nous permet de vérifier la cohérence de nos mesures. Une encapsulation à l'indium évite l'oxydation de la photocathode en assurant le vide entre la photocathode et l'anode. De plus, l'absorption importante de l'indium [MATHEWSON et MYERS 1971] permet de minimiser les réflexions multiples à l'intérieur du cristal. Enfin, cette encapsulation rend les cellules tests stables pour les manipulations.

Cette composition nous permet d'effectuer des mesures de PDE afin de déterminer les propriétés de la photocathode.

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.2 Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.

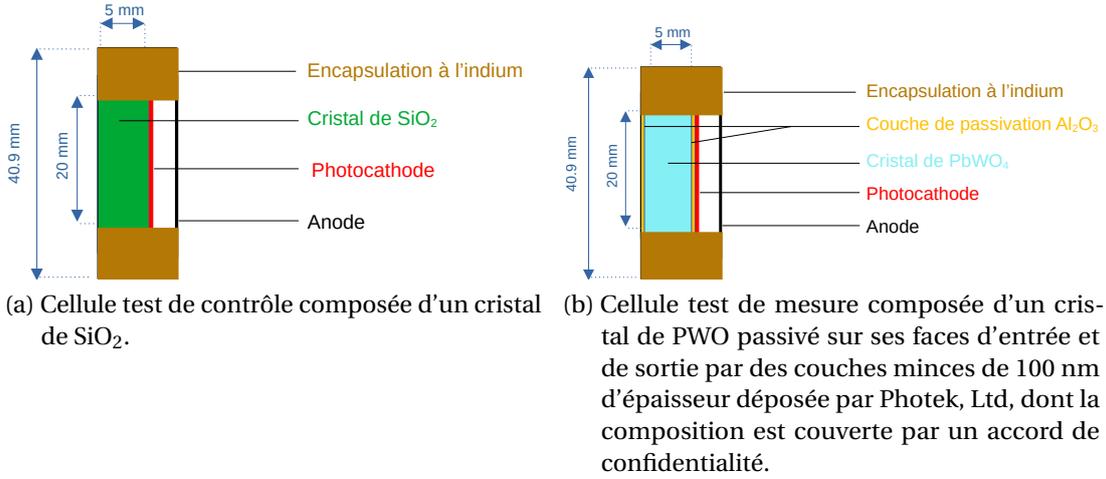


FIGURE 3.10 – Schéma en coupe des cellules tests (a) de contrôle et (b) de PWO réalisée par Photek, Ltd. La cellule test est un cylindre dont le cristal a une épaisseur de 5 mm et un diamètre de 20 mm. Avec l'encapsulation à l'indium, la cellule test mesure 40.9 mm de diamètre.

3.2.1.2 Efficacité de détection ou PDE

Notons T la transmittance du faisceau lumineux de l'air à la photocathode prenant en compte les réflexions multiples au sein du cristal. Dans ce cas nous avons :

$$T = \frac{aT_{AB}T_{BC}}{1 - a^2R_{AB}R_{BC}} \quad (3.3)$$

avec T_{AB} et T_{BC} les transmittances de l'air au cristal et du cristal à la photocathode comme illustré sur la Figure 3.11), et a le facteur d'atténuation par l'épaisseur de cristal suivant la loi de Beer-Lambert (Eq 2.5).

Dans le cas de la cellule test de contrôle en quartz, il n'y a pas d'atténuation par le cristal ($a = 1$), et T_{AB} et T_{BC} sont calculés à partir des coefficients de Fresnel pour une interface simple. Dans le cas de la cellule test de mesure, $T_{AB} = 1 - R_{AB}$ ($T_{BC} = 1 - R_{BC}$), avec $R_{AB} = r_{AB}r_{AB}^*$ ($R_{BC} = r_{BC}r_{BC}^*$) avec r_{AB} (r_{BC}) calculé à partir de l'Eq 1.35 et r_{AB}^* (r_{BC}^*) son conjugué complexe.

Une fois arrivés sur la photocathode, les photons ont une probabilité P_{att} d'être absorbés dans la photocathode. Le produit de la transmittance par la probabilité d'atténuation définit l'absorbance, notée A (Section 2.4.1). L'interaction photoélectrique d'un photon à l'intérieur de la photocathode génère un photoélectron qui a une probabilité P_{ext} de sortir de la photocathode et d'être collecté par l'anode de la cellule test. La probabilité d'extraction P_{ext} dépend du coefficient d'extraction intrinsèque de la photocathode. Le produit de la probabilité d'atténuation P_{att} et de la probabilité d'extraction P_{ext} définissent l'efficacité ou QE (pour *Quantum Efficiency*) de la photocathode. L'ensemble des relations entre les différentes propriétés des cellules tests sont résumées par l'équation 3.4.

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.2 Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.

$$PDE = \overbrace{T \times P_{att}}^A \times \underbrace{P_{ext}}_{QE} \quad (3.4)$$

La photocathode doit donc être suffisamment épaisse pour favoriser l'atténuation des photons, et suffisamment fine pour optimiser l'extraction des photoélectrons générés, avant qu'ils ne se recombinent dans la photocathode. Dans cette section, nous cherchons à déterminer les propriétés de la photocathode à partir de la PDE mesurée à l'Irfu du CEA-Saclay.

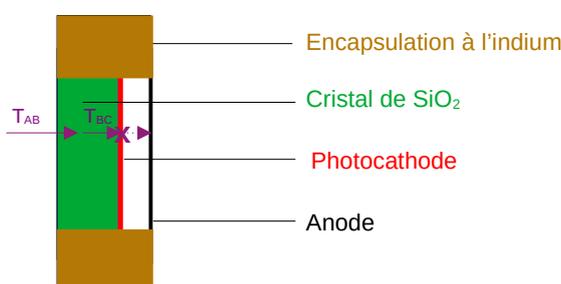


FIGURE 3.11 – Schéma du parcours du faisceau lumineux à travers la cellule test de contrôle.

3.2.1.3 Banc de mesure

Le banc de mesure est constitué comme suit :

- Une source de lumière au deutérium (allant de 190 à 400 nm) et une source halogène (allant de 360 à 2500 nm) (modèle DH-2000-BAL) permettant d'étudier un large spectre de lumière, notamment les longueurs d'onde de 300 à 700 nm qui correspondent au spectre d'émission du PWO.
- Un monochromateur (modèle Omni- λ 200i) pour sélectionner la longueur d'onde étudiée grâce à un réseau de diffraction de la lumière. La bande passante utilisée est de 10 nm, ce qui nous permet d'être précis (incertitude sur la longueur d'onde faible) tout en maximisant le rapport signal sur bruit.
- Une fibre optique pour conduire le faisceau de lumière d'un dispositif à l'autre.
- Une boîte noire dans laquelle est positionnée la sortie de la fibre optique et les deux dispositifs suivants
- Une lentille convergente placée à sa distance focale (10 mm) de la sortie de la fibre optique pour obtenir un faisceau de lumière parallèle.
- Un iris pour réduire le diamètre du faisceau lumineux.
- Un générateur pour mettre les cellules tests sous une tension de 200 V afin de drainer les photoélectrons vers l'anode et d'éviter leur recombinaison dans la photocathode.

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.2 Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.

- Un ampèremètre (modèle pico-Amperimeter Keithley 6517b) pour mesurer l'intensité du courant récolté par l'anode.

La lentille et l'iris permettent d'obtenir un faisceau lumineux qui s'inscrit parfaitement dans la fenêtre optique de la cellule test. La photocathode de référence a été construite par Newport Corporation (Irvine). Il s'agit du modèle 818-UV-L.

Ce dispositif expérimental est schématisé sur la Figure 3.12. Un schéma optique et une photographie du banc de mesure dans la boîte noire sont présentés sur les Figures 3.13a et 3.13b, respectivement.

En prenant en compte les incertitudes de mesure de tous les dispositifs utilisés, nous estimons la précision de la mesure de l'intensité de courant inférieure à 1 %. L'incertitude sur la sensibilité de la photocathode calibrée n'a pas été transmise par le fournisseur. Les erreurs statistiques ont été estimées à environ 2 % selon la longueur d'onde [THIBAUT 2021].

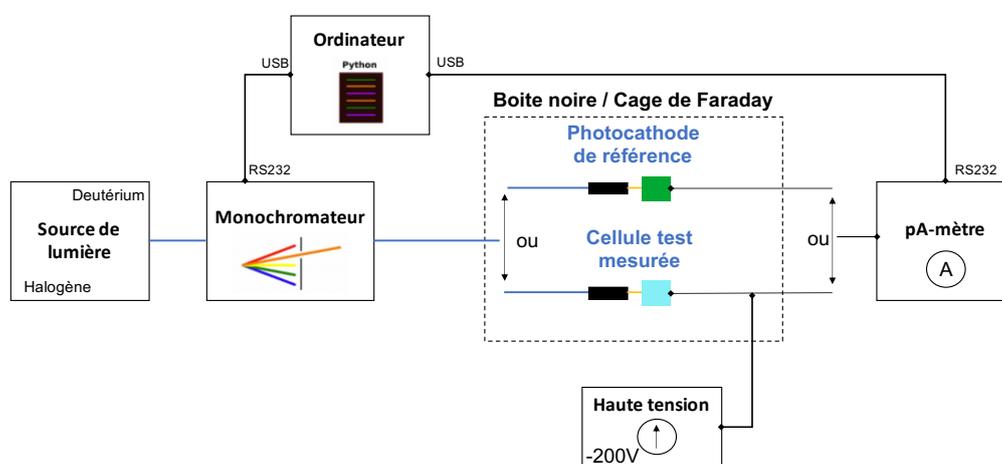


FIGURE 3.12 – Schéma complet du dispositif expérimental permettant la mesure de la PDE de la photocathode de référence et des cellules tests.

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.2 Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.

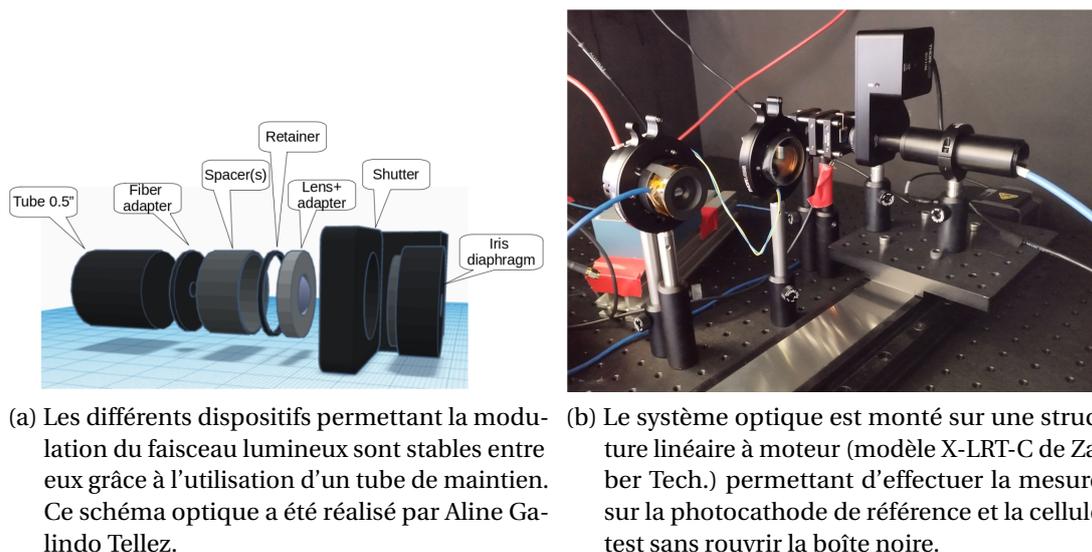


FIGURE 3.13 – (a) Schéma optique et (b) photographie du banc optique permettant la mesure de la PDE à travers la photocathode de référence et les cellules tests.

3.2.2 Analyse des résultats

Les mesures de courant ont été faites sur les deux cellules tests présentées ci-dessus et sur une photocathode calibrée de Newport Corporation (Irvine), modèle 818-UV-L, dont la sensibilité de 200 à 1100 nm, par pas de 10 nm, nous a été fournie par le constructeur. La mesure du courant est effectuée de 300 à 700 nm par pas de 10 nm, avec une bande passante du monochromateur de 10 nm.

3.2.2.1 Le flux

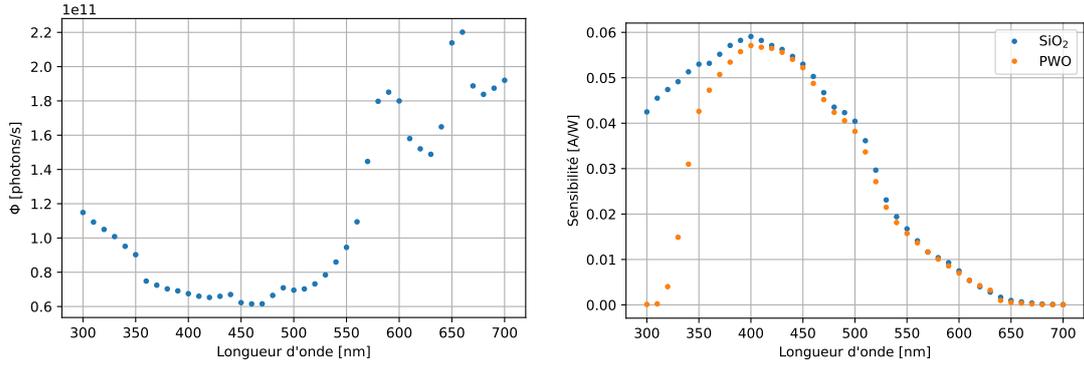
En connaissant la sensibilité de la photocathode de référence, il est possible de calculer le flux de particules par unité de temps, en mesurant l'intensité de courant en sortie (Figure 3.14a). Le flux est donné par :

$$\Phi = \frac{I_{cal} \times \lambda}{S_{cal} \times h \times c} \quad (3.5)$$

avec $h = 6.63 \times 10^{-34}$ J s la constante de Planck, $c = 3.00 \times 10^8$ m s⁻¹ la vitesse de la lumière dans le vide, S_{cal} la sensibilité de la photocathode de référence exprimée en ampère/watt et λ la longueur d'onde exprimée en mètre.

Le flux doit être suffisamment important pour pouvoir mesurer un courant en sortie des cellules tests, tout en évitant l'effet de charges d'espace qui peut se produire lorsque trop de photoélectrons sont mis en mouvement en même temps. Afin de caractériser les cellules tests, le flux de particules en fonction de la longueur d'onde est inchangé tout au long de l'expérience.

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince –
3.2 Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.



(a) Flux de particules par unité de temps calculé à partir de l'intensité de courant mesurée et de la sensibilité de la photocathode de référence. (b) Sensibilité mesurée pour les cellules tests.

FIGURE 3.14 – (a) Flux incident et (b) et sensibilité des cellules tests mesurés en fonction de la longueur d'onde.

3.2.2.2 Sensibilité et PDE des cellules tests

La sensibilité des cellules tests représente leur capacité à convertir une intensité lumineuse (nombre de photons par seconde) en intensité électrique (nombre d'électrons par seconde). Elle est calculée en faisant le rapport entre l'intensité du courant en sortie de la cellule test et l'intensité du courant en sortie de la photocathode de référence, corrigée par la sensibilité de la photocathode de référence :

$$S_{mes} = \frac{I_{mes}}{I_{cal}} S_{cal} \quad (3.6)$$

De cette manière, nous obtenons la sensibilité des cellules tests mesurées en fonction de la longueur d'onde présentées sur la Figure 3.14b.

La sensibilité est convertie en PDE de la manière suivante :

$$PDE = \frac{S_{mes} \times h \times c}{q \times \lambda} \quad (3.7)$$

avec $q = 1.6 \times 10^{-19}$ C la charge élémentaire de l'électron et λ la longueur d'onde exprimée en mètre. Les PDE obtenues pour les deux cellules tests sont présentées sur la Figure 3.15a.

Pour les longueurs d'onde inférieures à 400 nm, on observe une sensibilité et une PDE plus faible dans le cas de la cellule test de PWO, du fait de l'atténuation importante dans le cristal. La diminution de la PDE à partir de 400 nm, pour les deux cellules tests, est due au coefficient d'extinction κ des photocathodes, qui diminue avec la longueur d'onde (Figure 2.11a) et affecte ainsi la probabilité de conversion du photon incident par la photocathode P_{att} . Notons la cassure à 360 nm de la PDE dans le cas de la cellule test de quartz, qui résulte peut-être d'un problème de mesure.

3.2.2.3 Détermination de l'efficacité quantique des photocathodes

L'efficacité quantique des photocathodes qui composent les cellules tests peut être déterminée à partir de l'équation 3.4, en calculant le rapport entre la PDE mesurée et la transmittance calculée analytiquement.

La transmittance de l'air à la photocathode, qui prend en compte les réflexions multiples au sein du cristal, notée T , est calculée comme présenté dans la Section 3.2.1.2. Dans le cas de la cellule test de PWO, la longueur d'atténuation et l'indice de réfraction utilisés sont ceux déterminés par les *fit* de la Section 3.1.2 (Figure 3.4b et 3.6b), en supposant que le cristal de PWO, qui provient du même fournisseur, a les mêmes qualités que ceux utilisés pour les mesures de transmittance présentées précédemment. Dans le cas de la cellule test de SiO₂, l'indice de réfraction du cristal est celui présent dans la Figure 2.1. Enfin, l'indice de réfraction utilisé pour la photocathode est l'indice de réfraction extrait de l'article de Harmer *et al.* [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG *et al.* 2006] (Figure 2.11a).

Les transmittances calculées pour une épaisseur des couches minces d'oxyde d'aluminium de 100 nm sont tracées en fonction de la longueur d'onde sur la Figure 3.15b et les efficacités quantiques correspondantes sur la Figure 3.15c. Pour les longueurs d'onde proche de 300 nm, les valeurs de transmittance et de PDE dans le cas de la cellule test de PWO sont quasiment nulles et ne nous permettent pas d'estimer l'efficacité quantique. Afin d'avoir des valeurs cohérentes, l'efficacité quantique a été estimée seulement à partir de 350 nm dans le cas de la cellule test de PWO.

On constate que les efficacités quantiques déterminées pour les deux cellules tests sont pratiquement identiques. La différence visible entre 350 et 450 nm peut-être due à des erreurs de mesure, à des propriétés des matériaux différentes de celles choisies ou bien à une différence de composition des deux photocathodes des cellules tests. L'épaisseur théorique des couches minces d'oxyde d'aluminium est également sujette à caution et une étude de l'impact de cette épaisseur sur l'efficacité quantique a été menée. Une épaisseur de 70 nm donne l'efficacité quantique la plus proche de celle du SiO₂ (Figures 3.15b et 3.15c). Dans ce cas, l'efficacité quantique des deux cellules tests est pratiquement identique. Comme les photocathodes des deux cellules tests ont été déposées en même temps, leurs caractéristiques doivent être similaires et cela conforte le fait que l'épaisseur des couches minces d'oxyde d'aluminium est probablement plus proche de 70 nm que de 100 nm.

D'après la documentation de Hamamatsu [HAMAMATSU 2007], l'efficacité quantique de ces photocathodes atteint son maximum à 400 nm, entre 25 et 30 %, puis diminue jusqu'à être pratiquement nulle à 700 nm, en raison de son coefficient d'atténuation qui diminue avec la longueur d'onde. Dans notre cas, nous retrouvons bien la forme de la courbe d'efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde typique de ces photocathodes. L'efficacité quantique atteint son maximum aux alentours de 400 nm, avec un maximum d'environ 20 %. Ces valeurs sont plus faibles que celles de Hamamatsu, mais correspondent aux efficacités quantiques attendues par Photek, Ltd.

Notons également que le maximum de la courbe d'efficacité quantique à 400 nm

est favorable à la conception du module de détection ClearMind, qui est constitué d'un cristal de PWO dont le rendement de scintillation est maximal à 420 nm.

3.2.2.4 Détermination de la probabilité d'extraction des photocathodes

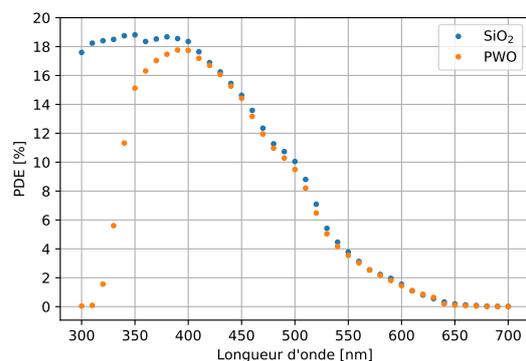
La probabilité d'extraction P_{ext} représente la probabilité des photoélectrons, générés suite à l'absorption d'un photon par la photocathode à sortir de la photocathode pour être collectés par l'anode. D'après l'équation 3.4, P_{ext} peut-être déterminée en calculant le rapport entre la PDE et l'absorbance A . De plus, en connaissant la transmittance, l'absorbance nous permet de déterminer la probabilité d'atténuation P_{att} . Les probabilités d'atténuation P_{att} et d'extraction P_{ext} sont les caractéristiques principales qui permettent de caractériser une photocathode.

L'absorbance est obtenue par simulation Monte Carlo, en prenant pour caractéristiques du PWO et du SiO_2 les mêmes que précédemment et en supposant que notre photocathode suit le modèle de Harmer *et al.* [S.W. HARMER, DOWNEY, WANG et al. 2006] (indice de réfraction et coefficient d'extinction). L'absorbance est calculée comme le rapport entre le nombre de photons absorbés dans la photocathode et le nombre de photons incidents, c'est-à-dire 50 000 photons tirés normalement sur la face d'entrée de la cellule dans notre cas. Nous obtenons l'absorbance en fonction de la longueur d'onde présentée sur la Figure 3.15d. L'absorbance de la cellule test de SiO_2 est plus importante en raison de sa transmittance plus élevée que celle de la cellule de PWO, pour des longueurs d'onde inférieures à 500 nm (Figure 3.15b).

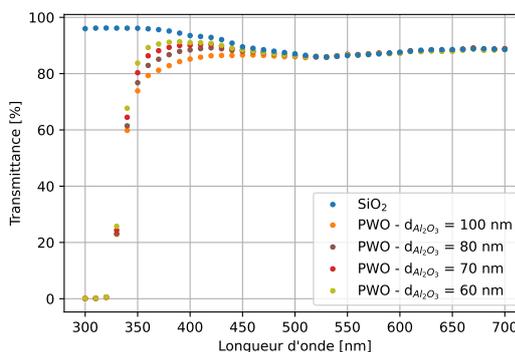
La probabilité d'atténuation P_{att} en fonction de la longueur d'onde peut alors être déterminée, et nous obtenons les valeurs présentées sur la Figure 3.15e. Notons que P_{att} est commandée par le coefficient d'extinction κ de la photocathode, ce qui explique qu'elle diminue lorsque la longueur d'onde augmente. On constate que P_{att} est très importante (pratiquement 100 % de 350 à 500 nm). En calculant la probabilité d'atténuation comme détaillé dans la Section 2.2.1.2, il est possible de déterminer que la distance moyenne parcourue par les photons dans la photocathode avant d'être absorbés est de 150 nm, soit en moyenne de six allers-retours.

La probabilité d'extraction est obtenue en faisant le rapport entre la PDE mesurée et l'absorbance simulée (ou bien le rapport entre l'efficacité quantique et P_{att}). La probabilité d'extraction P_{ext} est présentée sur la Figure 3.15f pour des épaisseurs de couches minces de 70 et 100 nm d'oxyde d'aluminium. On constate que pour une épaisseur de 70 nm, la probabilité d'extraction est pratiquement identique pour les deux cellules tests. Ceci conforte le modèle simulé des cellules tests qui ont été déposée en même temps et possèdent les mêmes caractéristiques. Notons que P_{att} étant pratiquement de 100 %, c'est la probabilité d'extraction qui détermine pratiquement la valeur de l'efficacité quantique en dessous de 500 nm. Ainsi, nous obtenons un maximum de P_{ext} de 20 % pour les longueurs d'onde entre 350 et 425 nm, ce qui est également favorable à la conception du module de détection ClearMind dont le cristal de PWO émet principalement des photons Tcherenkov et des photons de scintillation inférieurs à 450 nm.

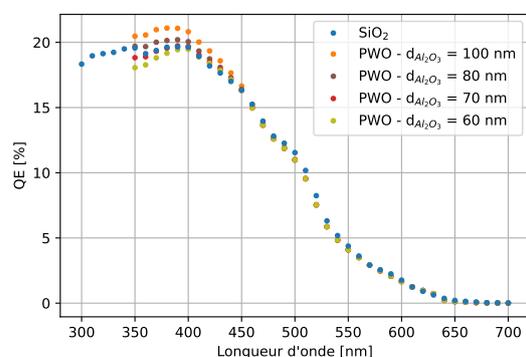
3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.2 Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.



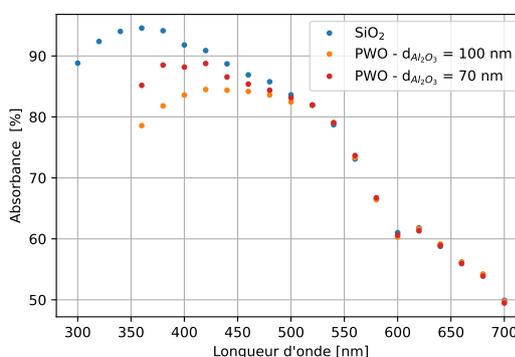
(a) PDE mesurée en fonction de la longueur d'onde.



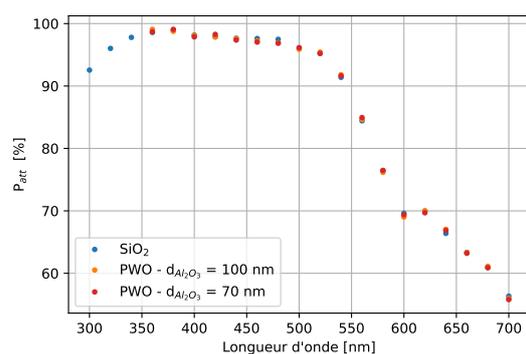
(b) Transmittance calculée en fonction de la longueur d'onde pour des photons non-polarisés incidents normalement sur la face d'entrée des cellules tests.



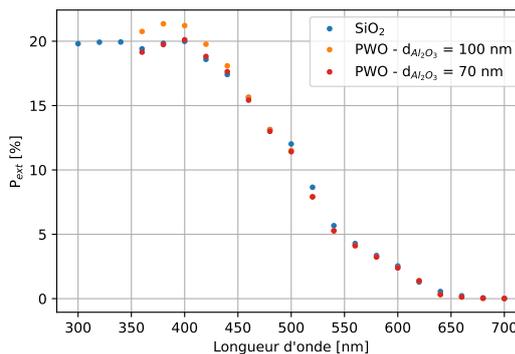
(c) Efficacité quantique ($QE = \frac{PDE}{T}$) en fonction de la longueur d'onde.



(d) Absorbance obtenue en fonction de la longueur d'onde par simulation Monte Carlo de photons non-polarisés incidents normalement sur la face d'entrée des cellules tests.



(e) Probabilité d'atténuation ($P_{att} = \frac{A}{T}$) par la photocathode en fonction de la longueur d'onde.



(f) Probabilité d'extraction ($P_{ext} = \frac{PDE}{A}$) de la photocathode en fonction de la longueur d'onde.

FIGURE 3.15 – Variation de (a) la PDE, (b) la transmittance T , (c) l'efficacité quantique, (d) l'absorbance A , (e) la probabilité d'atténuation P_{att} et (f) la probabilité d'extraction P_{ext} en fonction de la longueur d'onde déterminées pour les cellules tests de SiO_2 et de PWO, dans le cas d'une épaisseur des couches minces d'oxyde d'aluminium de 70 et 100 nm.

3 Validation expérimentale du modèle de transmittance à travers une couche mince – 3.2 Mesure de l'efficacité de détection à travers des cellules tests.

Les transmittances expérimentales comparées aux calculs analytiques nous auront permis de déterminer les caractéristiques des différents composants du module de détection ClearMind tels que l'indice de réfraction, la longueur d'absorption du PWO et les épaisseurs des couches de passivation. L'indice de réfraction déterminé est plus faible que les valeurs trouvées dans la littérature, ce qui pourrait peut-être s'expliquer si les faces du cristal n'étaient pas parfaitement parallèles. Néanmoins, les mesures de PDE ont ensuite pu être effectuées pour des cellules tests impliquant des cristaux de quartz et de PWO, ce qui nous a permis de vérifier que les propriétés des photocathodes déposées simultanément sur les deux cristaux étaient identiques. La comparaison des mesures avec les transmittances calculées nous a permis de déterminer l'efficacité quantique des photocathodes, et la comparaison des mesures et de la simulation Monte Carlo de déterminer leurs propriétés d'extraction. Ces propriétés sont optimales pour des longueurs d'onde autour de 420 nm, ce qui est favorable au module de détection ClearMind dont la fenêtre de PWO émet principalement à ces longueurs d'onde.

Enfin, la concordance entre les mesures expérimentales et les résultats obtenus par simulation Monte Carlo nous permet de valider l'implémentation du modèle optique de Geant4.

Les résultats de ce chapitre sont particulièrement importants pour justifier l'étude de la conception du module de détection ClearMind présenté dans le chapitre suivant. Nous allons en effet modéliser entièrement notre détecteur en simulant la génération de photons d'annihilation, leur interaction dans le cristal, la génération de photoélectrons suite à l'absorption des photons de scintillation et des photons Tcherenkov dans la photocathode et la multiplication de ces photoélectrons jusqu'à la génération d'un signal dans les lignes de transmission du module de détection.

Dû au retard de la livraison de certains éléments du banc optique, les mesures présentées dans ce chapitre et les analyses qui en découlent ont été menées à la fin de mon contrat de thèse, après que la modélisation détaillée dans le chapitre suivant ait été réalisée. Pour cette raison, les propriétés des matériaux modélisés sont basés sur des valeurs de la littérature. Ainsi, les propriétés du PWO sont extraites de l'article de Huang et Seo [HUANG et SEO 2007] et les propriétés optiques de la photocathode sont extraites de l'article de Motta et Schönert [MOTTA et SCHÖNERT 2005].

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4

Sommaire

4.1	Modélisation Monte Carlo du module de détection ClearMind	109
4.1.0.1	Les cristaux de PWO	110
4.1.0.2	Les photocathodes bialcalines	111
4.1.0.3	Amplification et analyse du signal	111
4.2	Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation	112
4.2.1	Résolution en énergie	115
4.2.2	Résolution temporelle de la coïncidence ou CTR	119
4.2.3	Résolution spatiale	124
4.2.4	Tableau récapitulatif	128

Dans ce chapitre, nous simulons la formation du signal, de la génération de la paire de photons d'annihilation, jusqu'à la réception du signal aux extrémités des lignes de transmission, en passant par le suivi des photons de scintillations et Tcherenkov générés dans le cristal de PWO. Cette modélisation complète par simulation Monte Carlo avec Geant4 nous permet de simuler le transport des photons optiques à travers la couche de passivation qui sépare le cristal de PWO et la photocathode. La simulation originale du module de détection ClearMind a été développée par Chi-Hsun Sung [Chi-Hsun SUNG 2022], [C.-H. SUNG, CAPPELLUGOLA, M. FOLLIN et al. 2023] lors de son travail de thèse au CEA-Irfu.

La modélisation du module de détection ClearMind est détaillée au début de ce chapitre, puis l'étude par Monte Carlo des résolutions en énergie, temporelles et spatiales sont présentées à la suite. Ces analyses permettent de souligner l'effet de la couche mince par rapport à la vision originale d'un cristal scintronique obtenu sans devoir recourir au dépôt d'une couche de passivation, et plus particulièrement du phénomène de transmission frustrée dans la photocathode d'une partie des photons

optiques.

4.1 Modélisation Monte Carlo du module de détection ClearMind

La modélisation Monte Carlo du module de détection ClearMind comprend la génération des photons d'annihilation dans la source, les deux détecteurs en coïncidence dans lesquels ces rayons gamma interagissent, la réception et l'analyse du signal.

La source uniforme mesure $59 \times 59 \times 1 \text{ mm}^3$ et le nombre de paires d'annihilation générées est de 2.5 millions, ce qui donne environ 60 000 évènements pour lesquels une interaction en coïncidence est détectée.

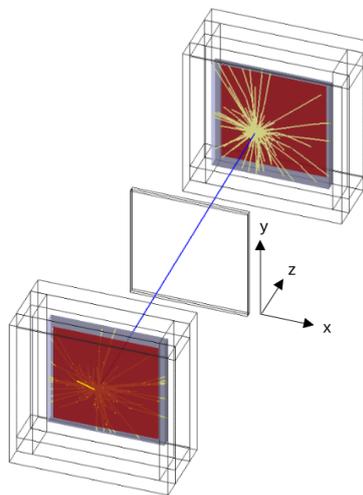


FIGURE 4.1 – Schéma de la modélisation Monte Carlo du module de détection ClearMind.

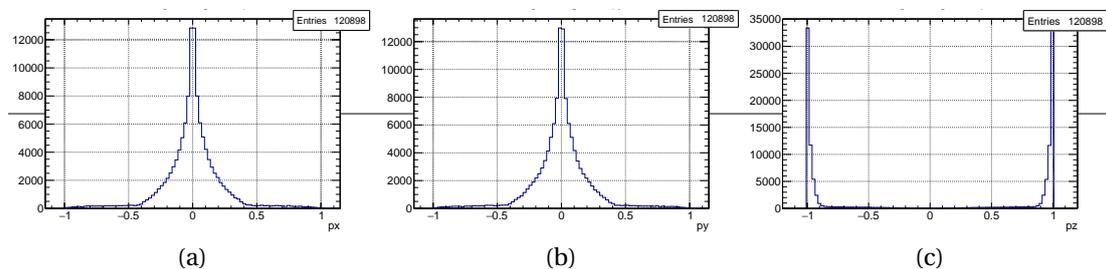


FIGURE 4.2 – Composantes (a) p_x (b) p_y (c) p_z du vecteur directeur des photons d'annihilation des coïncidences détectées provenant de la source.

Les modules de détection sont constitués d'un cristal de PWO et d'une photocathode. Ils sont positionnés face à face et chacun d'eux est encapsulé dans une boîte en plastique étanche à la lumière de 10 mm d'épaisseur pour éviter la détection de photons optiques provenant de l'autre cristal. La source est à 50 mm des deux détecteurs et son centre est positionné au point de coordonnées (0,0,0) constituant le centre de la scène simulée par Monte Carlo appelée World. Le schéma de la modélisation est présenté sur la Figure 4.1. La Figure 4.2 présente les composantes des vecteurs directeurs des rayons gammas ayant interagis dans les détecteurs en coïncidence.

Le transport des photons optiques est réalisé à partir du modèle `Unified` de Geant4. Les particules générées au cours de la modélisation sont suivies pas à pas par Geant4, c'est-à-dire que l'on suit toutes leurs interactions au cours de leur parcours, jusqu'à leur absorption ou leur sortie du cristal. La `Physics List` de Geant4 utilisée pour la simulation est basée sur le module de physique électromagnétique `G4EmPenelopePhysics`, qui est appropriée pour la simulation de rayons gammas et d'électrons en dessous de 1 GeV. La valeur de la coupure ou *cut* en énergie utilisée par le transport des particules est la valeur par défaut de Geant4, qui permet de suivre toutes les particules générées au cours de la simulation, sans rallonger significativement le temps de simulation [Chi-Hsun SUNG 2022].

4.1.0.1 Les cristaux de PWO

Les deux détecteurs sont constitués d'un cristal de PWO de $59 \times 59 \times 5 \text{ mm}^3$ et de densité 8.28 gcm^{-3} . Une photocathode est déposée sur leur faces de sortie soit directement (cas dit *idéal* étudié dans la suite de ce chapitre), soit après passivation de la face par une couche mince. Le cas dit *témoin* présenté dans la suite est constitué d'une couche mince d' Al_2O_3 d'une épaisseur de 100 nm. Les faces d'entrée et de sortie du cristal ne sont pas absorbantes. La face d'entrée (interface air/PWO) a une rugosité de 20° afin de reproduire au mieux les propriétés de diffusion optique [M. FOLLIN, SHARYY, BARD et al. 2021] et la face de sortie (interface PWO/PC) est polie. Les quatre autres faces du cristal sont noires, i.e absorbantes, pour limiter les réflexions internes au cristal.

Comme la modélisation de la biréfringence n'est pas implémentée dans Geant4, l'indice de réfraction utilisé pour le PWO est la moyenne des indices de réfraction ordinaire et extraordinaire tirés de l'article de Huang et Seo [HUANG et SEO 2007]. Sa longueur d'atténuation suit le modèle d'Annenkov *et al.* [ANNENKOV, KORZHIK et LECOQ 2002]. Lors de l'interaction des rayons gammas dans le cristal, des photons de scintillations et des photons Tcherenkov peuvent être générés. Il nous est également possible de générer uniquement des photons Tcherenkov. Le PWO possède deux modes de décroissance principaux : une rapide avec une constante de temps de décroissance de l'émission de 1.79 ns dans 58.6 % des cas, et une lente avec une constante de temps de décroissance de l'émission de 6.41 ns. Le spectre d'émission scintillante de Ming *et al.* [MING, HONG-FANG, CHENG et al. 2001] est reproduit (Figure 1.17b).

4.1.0.2 Les photocathodes bialcalines

La photocathode déposée sur la face arrière du cristal est une photocathode bialcaline bleue de 25 nm d'épaisseur. Ses propriétés optiques tel que son indice de réfraction (Figure 4.3a), sa probabilité d'atténuation $P_{att}(\lambda, \theta)$ (Figure 4.3b) et sa probabilité d'extraction $P_{ext}(\lambda)$ (Figure 4.3c) suivent le modèle de Motta et Schönert [MOTTA et SCHÖNERT 2005]. La probabilité d'extraction a été déduite par ajustement de l'efficacité quantique et la longueur d'absorption présentées dans l'article de Motta et Schönert. Notons que les valeurs de probabilité d'atténuation ne correspondent pas à celles présentées dans le chapitre précédent, qui ont été déduites par simulation Monte Carlo et qui prennent donc en compte le parcours prolongé des photons, du aux réflexions multiples dans la photocathode.

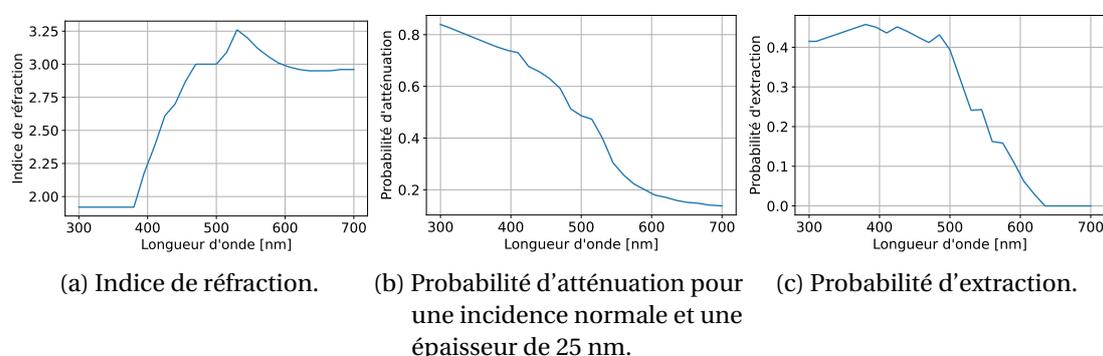


FIGURE 4.3 – Propriétés de la photocathode bialcaline bleue utilisée [MOTTA et SCHÖNERT 2005]. L'indice de réfraction n'étant défini qu'à partir de 380 nm, nous le considérons comme constant pour des longueurs d'onde inférieures.

Nous notons $QE(\lambda, \theta)$ l'efficacité quantique de la photocathode définie comme le produit de la probabilité d'atténuation et de la probabilité d'extraction :

$$QE(\lambda, \theta) = P_{att}(\lambda, \theta) \times P_{ext}(\lambda) \quad (4.1)$$

Dû à son important coefficient d'absorption, la photocathode n'est pas considérée comme une couche mince. Sa face arrière est rugueuse avec une rugosité de 30°.

4.1.0.3 Amplification et analyse du signal

Dans cette modélisation, nous utilisons un MCP-PMT pour optimiser la résolution temporelle. Le photoélectron généré suite à l'absorption du photon de scintillation ou Tcherenkov dans la photocathode peut soit pénétrer directement dans un des trous de 15 μm de la galette de MCP-PMT, avec une probabilité de 62.5%, soit rebondir sur la galette avant de pénétrer dans un des micro-canaux [KRIZAN 2009]. La double galette de micro-canaux nous permet d'avoir un gain d'environ 10^6 . Une carte d'anodes,

constituée de 64×64 anodes avec un *pas* de $828 \mu\text{m}$ est modélisée à quelques millimètres de la double galette du MCP-PMT. Trente-deux lignes de transmission (TL) relient deux rangées d'anodes, permettant ainsi de minimiser le nombre de canaux de lecture (chaque TL est lue aux deux extrémités) et de manière subséquente le temps d'analyse des données. Les TL sont de type Shin-Etsu MT-type Inter-Connector® [SHIN-ETSU POLYMER 2023]. La vitesse de propagation des impulsions le long des TL est environ 35% de la vitesse de la lumière. Les signaux propagés aux extrémités des TL sont ensuite amplifiés par deux cartes d'amplification avant d'être numérisés à partir du module SAMPIC [BRETON, DE CACQUERAY, DELAGNES et al. 2016]. Une discrimination à fraction constante ou CFD (pour *Constant Fraction Discrimination*) de 50% est utilisée pour modéliser la logique de déclenchement du module de détection ClearMind.

La Figure 4.4a montre la différence de temps simulée entre la collection dans la photocathode et la détection du signal. Ce signal reproduit le *fit* de la différence de temps mesurée entre le signal de déclenchement d'une impulsion de lumière générée par un laser picoseconde et sa détection par le MCP-PMT par une triple gaussienne, prenant ainsi en compte les détections directes et les électrons rétro-diffusés. L'étalement de la gaussienne principale, qui correspond aux électrons détectés directement, i.e. sans rétro-diffusion, a pour écart-type $\sigma_1 = 33$ ps, tandis que les deux gaussiennes suivantes, qui représentent les signaux retardés par la rétro-diffusion des électrons, ont pour écarts-types $\sigma_2 = 78$ ps et $\sigma_3 = 220$ ps. [C.-H. SUNG, CAPPELLUGOLA, M. FOLLIN et al. 2023]. La résolution temporelle du MCP-PMT, qui se monte à 86.5 ps, est donnée par la largeur à mi hauteur de la distribution de temps entre le temps d'émission du photoélectron par la photocathode et la détection du signal. [Chi-Hsun SUNG 2022].

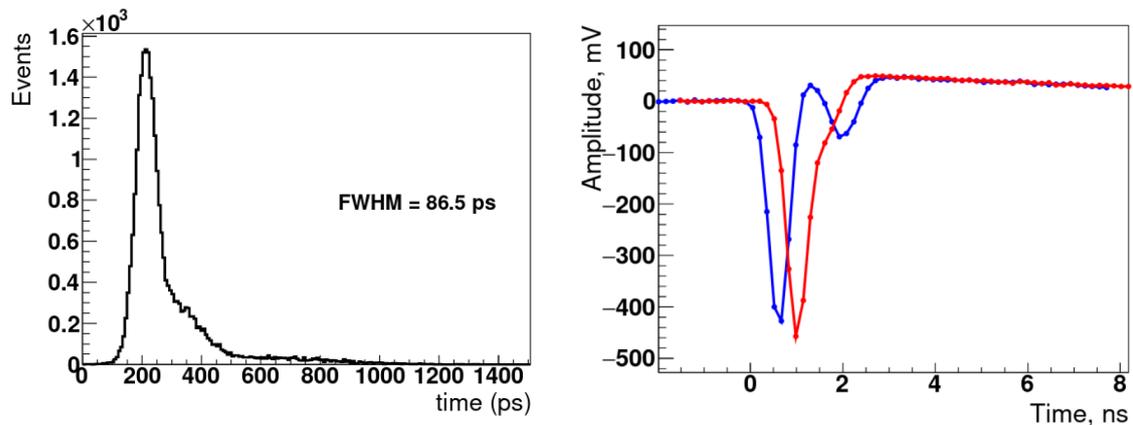
Le signal en sortie des TL est représenté sur la Figure 4.4b. La charge correspond à l'intégrale de la partie négative des signaux reçus à aux extrémités gauche et droite de la TL.

4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

Dans cette section nous présentons une étude comparative de la résolution en énergie, de la résolution temporelle de la coïncidence ou CTR (pour *Coincidence Time Resolution*) et de la résolution spatiale déterminées en fonction des paramètres de la simulation. Toutes ces résolutions ont été préalablement définies dans le Chapitre 1 (Section 1.2.3).

Afin de pouvoir comparer l'impact de chacun des paramètres, nous partons d'une modélisation témoin, composée d'une couche mince de 100 nm d' Al_2O_3 , séparant le cristal de la photocathode. Pour les cas étudiés suivants, nous faisons varier un paramètre à la fois. Nous simulons également un cas idéal où la photocathode est déposée directement sur le cristal, sans passivation par une couche mince. Ce cas n'est pas possible en réalité, dû fait de l'altération inéluctable de la photocathode par les atomes de plomb et d'oxygène du PWO, mais il représente l'objectif idéal décrit

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation



- (a) Simulation de la différence entre le temps de collection de la photocathode et le temps du signal détecté [Chi-Hsun SUNG 2022].
- (b) Signaux simulés à droite (en rouge) et à gauche (en bleu) de la TL, lors d'une détection à -20 mm du centre du détecteur [Chi-Hsun SUNG 2022]. Le second pic sur la courbe bleu résulte de la réflexion sur les connecteurs aux extrémités des lignes à transmission.

FIGURE 4.4 – Simulation des temps de détection de la modélisation.

pour le projet ClearMind.

Les différents cas étudiés sont présentés dans la Table 4.1. Nous testons l'impact de l'épaisseur de la couche mince (cas Al_2O_3 - 50 nm et Al_2O_3 - 20 nm comparés au cas témoin), du choix du matériau de la couche mince (cas témoin, TiO_2 - 100 nm et SiO_2 - 100 nm) et nous soulignons l'importance de la transmission frustrée ou FTIR (pour *Frustrated Transmission Internal Reflection*) avec les cas Al_2O_3 - NoFTIR et SiO_2 - NoFTIR, composés d'une couche mince de 100 nm d' Al_2O_3 et de SiO_2 , réciproquement, pour lesquelles nous avons supprimé le phénomène de transmission frustrée. Pour ces deux cas, seul le phénomène de réflexion totale est appliqué aux angles supérieurs à l'angle limite entre le cristal et la photocathode, soit environ 40° dans le cas d'une couche mince de quartz (SiO_2) et 50° dans le cas d'une couche mince d'alumine (Al_2O_3).

Nous testons également l'impact des réflexions dans le cristal de PWO avec le cas d'une interface *cristal/air polie*, pour lequel nous changeons simplement la rugosité de la face d'entrée, en la faisant passer d'une rugosité de 20° à 0° . La face de sortie du cristal, qui est en contact avec la photocathode, reste polie et les quatre faces latérales du cristal sont toujours noires et absorbantes. Ce cas pour lequel la photocathode est déposée directement sur le cristal est comparé au cas idéal, tout comme le cas QE 15%, qui simule une photocathode deux fois moins efficace que le cas idéal. Motta et Schönert [MOTTA et SCHÖNERT 2005], donnent une efficacité quantique des photocathodes bialcalines bleues d'environ 30 % à 420 nm pour une incidence normale dans l'air. Or les mesures expérimentales faites par Photek sur photocathode donnent une efficacité quantique proche des 15%.

Pour terminer, nous comparons nos résultats avec ceux que nous avons obtenus

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

avec un couplage du cristal à la photocathode par gel optique d'une épaisseur de 10 μm . Cette comparaison nous permettra de mettre en évidence les avantages de la couche mince par rapport au gel couramment utilisé.

	Matériau CM	Épaisseur CM	<i>crystal/</i> <i>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%

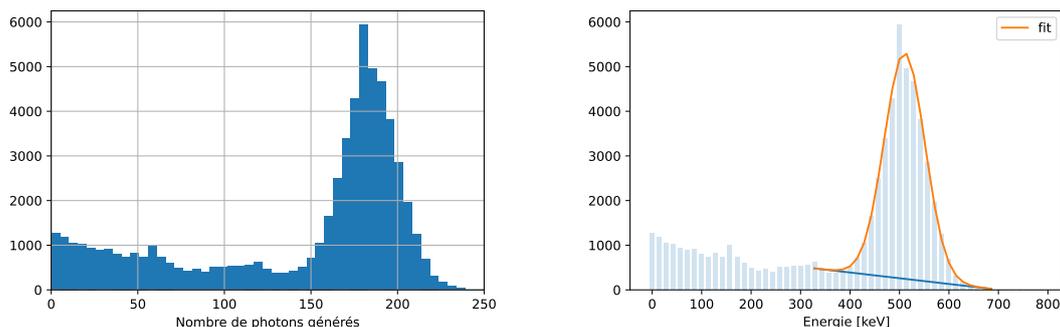
Tableau 4.1 – Tableaux récapitulatifs des différents cas étudiés. Pour chaque simulation, un seul paramètre surligné en gris parmi le matériau ou l'épaisseur de la couche mince (CM), la rugosité de l'interface *crystal/air*, le couplage par gel optique du cristal à la photocathode, la prise en compte de la transmission frustrée à travers la couche mince (FTIR) ou l'efficacité quantique (QE) de la photocathode varie par rapport au cas témoin apparaît en gris dans le tableau. On note qu'il n'y a pas d'atténuation dans la couche mince quel que soit le matériau.

Les résultats obtenus par les deux détecteurs gauche et droit de la scène simulée ont été comparés et sont statistiquement comparables. Nous présenterons donc les résultats du détecteur gauche.

Les résolutions obtenues pour chaque cas étudié sont présentées dans la Table 4.3 et sont détaillées dans la suite de ce chapitre.

4.2.1 Résolution en énergie

Le nombre de photons de scintillations générés dans le PWO (Figure 4.5a) suite à l'interaction d'un rayon gamma dépend du matériau du cristal et de l'énergie déposée par le gamma. Dans le cas du PWO, un dépôt de 511 keV génère environ 180 photons de scintillations plus 20 photons Tcherenkov. Il est possible de calibrer la réponse du cristal en énergie (Figure 4.5b).



(a) Distribution du nombre de photons générés. (b) Spectre en énergie. La largeur du pic à pleine énergie se monte à 97.00 ± 3.02 keV FWHM correspondant à une résolution en énergie intrinsèque du PWO de $19 \% \pm 3.31 \%$ FWHM à 511 keV.

FIGURE 4.5 – Distribution du nombre de photons générés par évènement dans le détecteur gauche

Dans ce chapitre, pour différencier les photons générés des photons détectés, nous appellerons *photoélectrons* (pe) les photons ayant interagi dans la photocathode et étant à l'origine d'un signal. La distribution du nombre de pe dans le cas témoin est illustrée par la Figure 4.6a et dans le cas idéal par la Figure 4.6b. On constate tout d'abord que pour un grand nombre d'évènements, aucun photoélectron n'a été détecté suite à l'interaction du rayon gamma dans le cristal (les photons n'ont pas atteint la photocathode). Le pic à pleine énergie est ajusté par une gaussienne, dont la moyenne se monte à environ 20 pe dans le cas témoin et plus de 30 pe dans le cas idéal. Ceci signifie qu'en moyenne dans le cas témoin $11 \% (\frac{20}{180})$ des photons générés suite à un dépôt de 511 keV sont détectés, contre 17.5% dans le cas idéal.

La moyenne et l'écart-type résultant du fit gaussien sur les Figures 4.6a et 4.6b sont dans le cas témoin de 19.73 ± 0.15 pe et de 10.53 ± 0.5 pe FWHM, respectivement, ce qui donne une résolution en énergie de $53.37 \pm 2.9 \%$ FWHM. Dans le cas idéal, elles se montent à 32.18 ± 0.08 pe et 6.49 ± 0.11 pe FWHM, respectivement, et nous obtenons une meilleure résolution en énergie, de $49.0 \% \pm 1.5 \%$ FWHM, grâce au nombre plus important de photoélectrons.

Cette mauvaise résolution est cohérente au vu du très faible nombre de photons de scintillation générés par évènement (environ 180 photons de scintillation pour 511 keV déposés dans le PWO (Figure 4.5a)), par rapport aux cristaux de LSO, qui permettent

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

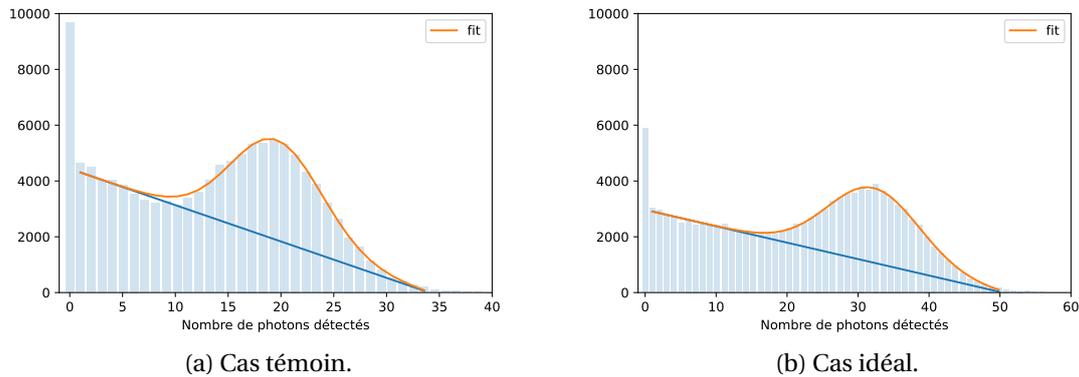
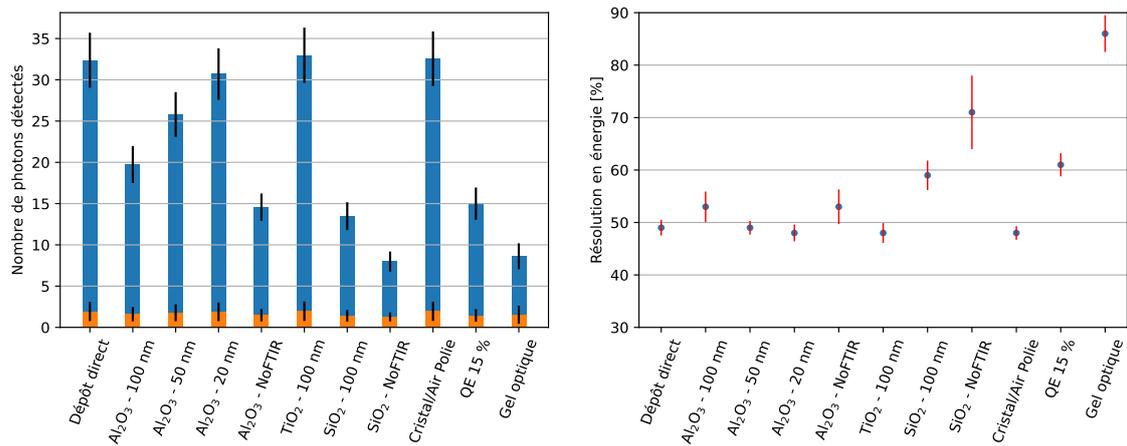


FIGURE 4.6 – Distribution du nombre de photon détectés (photoélectrons) pour le détecteur gauche, dans le cas (a) témoin (Al_2O_3 - 100 nm) et (b) idéal (Dépôt direct). Le fit orange correspond à la somme d'un polynôme du premier degré Compton (bleu) et d'une gaussienne.



(a) Moyenne du fit gaussien sur le nombre de photoélectrons détectés à 511 keV pour chaque cas étudié, pour une simulation avec photons de scintillation et Tcherenkov (en bleu) et pour une émission de photons Tcherenkov uniquement (en orange). La barre verticale noire représente l'écart-type du fit gaussien. (b) Résolution en énergie à 511 keV pour chaque cas étudié.

FIGURE 4.7 – (a) Nombre de photoélectrons et (b) résolution en énergie dans chaque cas étudié.

d'atteindre une résolution en énergie d'environ 10 % dans le cas du Biograph Vision de Siemens [JIANG, CHALICH et DEEN 2019], grâce à un rendement de scintillation de plus de 25 000 photons générés par MeV.

La résolution en énergie a été calculée pour tous les cas étudiés de la même manière. La Figure 4.7a montre la moyenne et l'écart-type du fit gaussien sur le nombre de

photoélectrons détectés pour chaque cas étudié. La Figure 4.7b montre la résolution en énergie obtenue pour chaque cas étudié.

Tout d'abord, on constate que pour un même matériau (ici Al_2O_3), le nombre de photoélectrons augmente lorsque l'épaisseur de la couche mince diminue. Nous obtenons ainsi une vingtaine de photoélectrons pour une épaisseur de 100 nm, contre une trentaine pour 20 nm. Ceci est dû à la transmittance du cristal à la photocathode (Figure 4.8b), qui augmente lorsque l'épaisseur de la couche mince d'alumine diminue. En effet, plus la couche de passivation est fine devant la profondeur de pénétration de l'onde évanescente et plus la transmittance à travers la couche de passivation est importante. L'augmentation du nombre de photoélectron est à l'origine d'une meilleure résolution en énergie : ainsi, une augmentation de 55 % du nombre de photoélectrons détectés permet d'améliorer la résolution en énergie de 10.21 %. Ainsi, le cas Al_2O_3 - 20 nm permet d'atteindre une résolution aussi bonne que dans le cas idéal.

De même, la simulation d'une couche mince de TiO_2 , présente une grande quantité de photoélectrons, avec une moyenne de 33 pe et une résolution en énergie d'environ 48 % FWHM. Le TiO_2 est le seul matériau présentant un indice de réfraction (Figure 4.8a) toujours supérieur à celui du PWO. De plus, à partir de 450 nm, son indice de réfraction est également inférieur à celui de la photocathode, ce qui signifie qu'il n'y a plus aucune réflexion totale possible sur l'interface du cristal à la photocathode. La transmittance des photons à travers la couche mince est donc optimale. La Figure 4.8b montre la transmittance du cristal à la photocathode, pondérée en fonction de l'angle d'incidence et pour les différents cas étudiés. A partir de 450 nm, la transmittance dans le cas d'une couche mince de TiO_2 (en vert) est la plus importante, ce qui induit un nombre important de photons détectés et donc une bonne résolution en énergie. En deçà de 450 nm, les transmittances pour les cas Al_2O_3 - 20 nm (en gris) et idéal (en rouge) sont aussi importantes que le cas TiO_2 - 100 nm, ce qui explique que le nombre de photoélectrons et la résolution en énergie sont similaires pour ces trois cas étudiés.

De la même manière, il est également possible d'expliquer la diminution du nombre de photons détectés avec une couche mince de SiO_2 à partir des Figures 4.8a et 4.8b. Le quartz ayant un indice de réfraction très faible, la transmittance à travers la couche mince est bien plus difficile que dans le cas d'une couche mince d' Al_2O_3 et de TiO_2 , en raison des réflexions totales à l'interface entre le cristal et la couche mince. En effet, à 500 nm, le cas SiO_2 présente un angle limite de 40° , contre 51.5° dans le cas témoin et aucun dans le cas TiO_2 . Ceci justifie le faible nombre de photons détectés avec une couche mince de SiO_2 avec pour conséquence une résolution en énergie plus importante.

De plus, le SiO_2 et l' Al_2O_3 ayant des indices de réfractifs inférieurs à celui du cristal et de la photocathode (Figure 4.8a), le phénomène de transmission frustrée est possible pour des angles supérieurs aux angles limites. Les cas SiO_2 - NoFTIR et Al_2O_3 - NoFTIR permettent de souligner l'importance de ce phénomène. Dans le cas d'une couche mince de SiO_2 , on constate que la suppression de la transmission frustrée engendre une dégradation de la résolution en énergie (en moyenne de 10%) (Figure 4.7b). Dans le cas d'une couche mince en alumine, la quantité de photoélec-

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

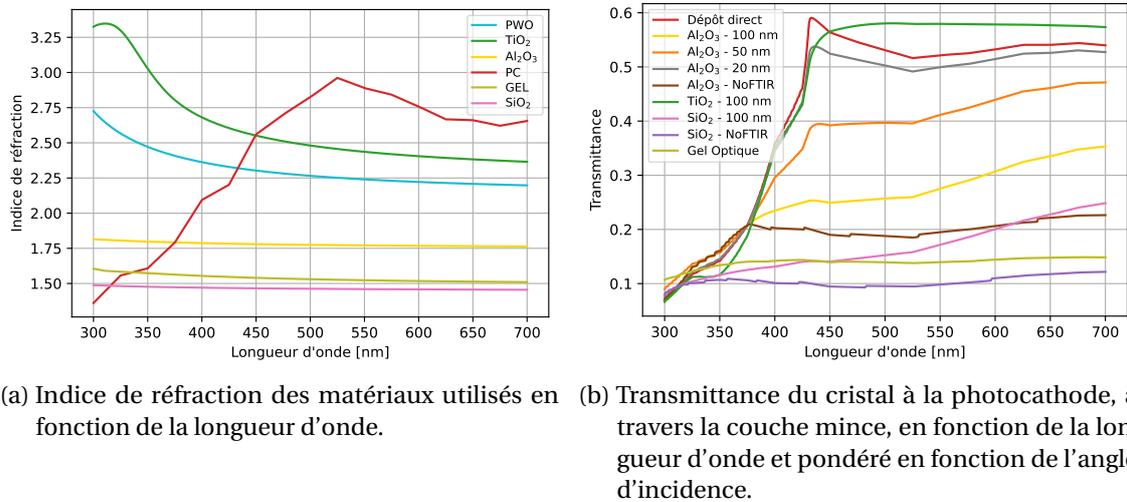


FIGURE 4.8 – (a) Indice de réfraction et (b) transmittance pondérée par l'angle d'incidence pour chaque cas étudié.

trons augmente de 25 % grâce à la FTIR par rapport au cas NoFTIR (Figure 4.7a). En revanche, la résolution en énergie étant calculé à partir du nombre de photoélectrons et de la largeur de la distribution, elle n'est finalement pas impactée par le phénomène de transmission frustrée. En comparant les cas SiO_2 - 100 nm et SiO_2 - NoFTIR, et Al_2O_3 - 100 nm et Al_2O_3 - NoFTIR sur la Figure 4.8b, nous pouvons vérifier que la transmission frustrée favorise la transmittance des photons à la photocathode. Ces deux expériences mettent donc en avant l'importance du phénomène de transmission frustrée, qui permet d'améliorer la transmittance des photons à travers la couche de passivation et ce faisant d'optimiser la résolution en énergie.

Le cas *crystal/air polie*, nous permet de nous rendre compte du fait que la rugosité de la surface d'entrée du cristal n'a pas d'impact sur le nombre de photoélectrons, ni sur la résolution en énergie.

Comme attendu, en passant d'une efficacité quantique de 30 à 15 % (cas QE 15 %), nous divisons par deux la probabilité qu'un photon atteignant la photocathode génère un photoélectron. Nous attendons donc un nombre de photoélectrons par rapport au cas idéal divisé de moitié, ce qui est confirmé par la Figure 4.7a. En prenant en compte la FWHM de la distribution, on obtient une résolution en énergie moyenne de 61 % FWHM, contre 49 % FWHM dans le cas idéal, soit environ 25 % d'amélioration grâce à une efficacité quantique multipliée par deux. L'efficacité quantique permet donc d'améliorer la détection et ainsi d'optimiser la résolution en énergie.

L'indice de réfraction faible du gel optique est en défaveur de la transmittance des photons du cristal à la photocathode. De plus, le gel optique n'étant pas considéré comme une couche mince (épaisseur de 10 μm), le phénomène de transmission frustrée n'existe pas. La transmittance du cristal de PWO à la photocathode est donc nulle pour des angles supérieurs à l'angle limite (environ 40° en fonction de la longueur d'onde). Ceci engendre une diminution importante du nombre de photoélectrons,

passant d'une moyenne de 20 pe dans le cas témoin et 32 pe dans le cas idéal, à 8 pe dans le cas du gel optique (Figure 4.7a). De ce fait, la résolution en énergie est grandement impactée (Figure 4.7b) avec une moyenne de 86 % FWHM dans le cas du gel optique, soit 59.3 % et 74 % inférieure au cas témoin et idéal, respectivement.

Ces différentes simulations ont mis en évidence que le phénomène de transmission frustrée au sein de la couche de passivation nous permet de maximiser le nombre de photons transmis à la photocathode. Il est préférable de choisir une couche de passivation la plus fine possible et un matériau possédant un indice de réfraction intermédiaire entre celui du cristal et celui de la photocathode.

4.2.2 Résolution temporelle de la coïncidence ou CTR

La résolution temporelle de la coïncidence ou CTR est donnée par la largeur de la distribution de la différence des temps de détection de paires de photons d'annihilation appelée distribution de temps de vol ou TOF (pour *Time Of Flight*). La CTR sera calculée dans le cas d'une émission de photons de scintillation et de photons Tcherenkov (que nous qualifierons de *simulation complète*) et pour une émission de photons Tcherenkov uniquement (que nous qualifierons de *simulation Tcherenkov*).

Les Figures 4.9a et 4.9b montrent la distribution de la différence des temps d'arrivée entre les deux détecteurs, dans le cas témoin, pour une simulation complète et pour une simulation Tcherenkov, respectivement. Les moyennes nulles de ces deux distributions de temps-de-vol sont la preuve que la source est bien située à égale distance entre les deux détecteurs.

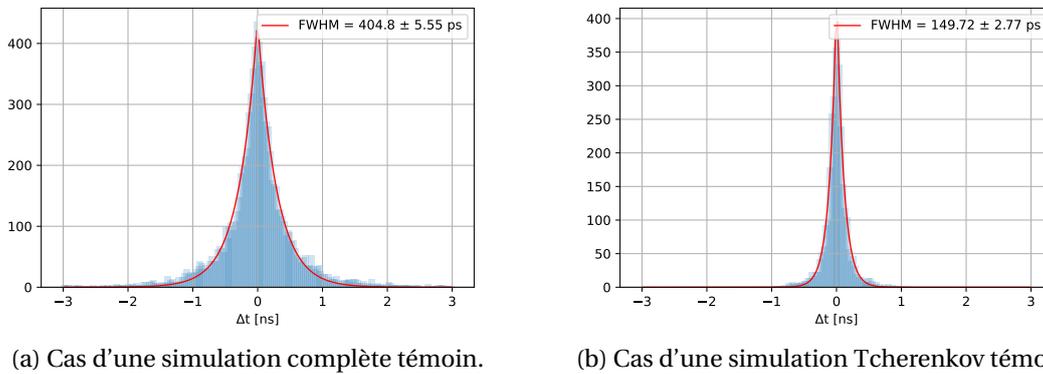


FIGURE 4.9 – Distribution du temps de vol (différence de temps de détection) pour le cas témoin (Al_2O_3 - 100 nm) dont la largeur à mi-hauteur correspond à la CTR.

Ces deux distributions suivent une loi Laplacienne donnée par :

$$f(x|a, b, \mu) = \frac{a}{2b} e^{-\frac{|x-\mu|}{b}} \quad (4.2)$$

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

avec $\mu = 0$ le paramètre de position, a le paramètre d'amplitude et b le paramètre de décroissance exponentielle. Le maximum est atteint lorsque $x = \mu$, soit $\frac{a}{2b}$. Pour calculer la FWHM, nous cherchons x_1 et x_2 pour lesquels la courbe atteint la moitié de l'amplitude maximum, soit :

$$f(x_{1,2}|a, b, \mu) = \frac{a}{2b} e^{-\frac{|x_{1,2}|}{b}} = \frac{a}{4b} \quad (4.3)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} x_1 = \mu - b \times \ln(2) \\ x_2 = \mu + b \times \ln(2) \end{cases} \quad (4.4)$$

La largeur à mi-hauteur est donc donnée par :

$$x_2 - x_1 = 2b \ln(2) \quad (4.5)$$

La forme laplacienne résulte de la convolution de deux lois exponentielles régissant le temps d'émission des photons. En effet, la distribution du temps d'émission des photons de scintillation peut être modélisée par la somme de deux lois exponentielles :

$$Ae^{-\frac{t}{\tau_f}} + Be^{-\frac{t}{\tau_s}} \quad (4.6)$$

avec A et B les amplitudes respectives des deux exponentielles, et τ_f et τ_s les constantes de temps de décroissance de la scintillation rapide et lente. Dans le cas du PWO, nous avons $\tau_f = 1.79$ ns et $\tau_s = 6.41$ ns. Ainsi, la Figure 4.10 représente la distribution du temps d'émission des photons dans le cas d'une simulation complète (émission de photons de scintillation et de photons Tcherenkov). Les quatre arguments p_0 , p_1 , p_2 et p_3 résultant de l'ajustement de la somme des exponentielles correspondent aux paramètres A , B , $-\frac{1}{\tau_f}$ et $-\frac{1}{\tau_s}$, respectivement. A partir des valeurs de l'ajustement, nous retrouvons bien les constantes de temps de décroissance de la scintillation τ_f et τ_s du PWO qui ont été simulées.

Dans le cas d'une émission de photons Tcherenkov uniquement (Figure 4.9b), la forme Laplacienne est due au fait que la probabilité d'interaction décroît de façon exponentielle en fonction de la profondeur d'interaction du rayon gamma dans le cristal (Loi de Beer-Lambert, Section 1.1.2.5). Ce phénomène intervient aussi dans le cas d'une émission de photons de scintillation, mais est négligeable par rapport à l'impact de la décroissance exponentielle de la scintillation.

Les ajustements des laplaciennes donnent une CTR de 404.8 ± 5.55 ps FWHM dans le cas de la simulation complète du cas témoin. D'après l'Eq (1.47) et en partant du principe que les deux détecteurs ont une résolution temporelle t_{res} identique, nous avons :

$$t_{res} = \frac{CTR}{\sqrt{2}} = 286.2 \text{ ps FWHM} \quad (4.7)$$

Dans le cas d'une émission de photons Tcherenkov uniquement, nous obtenons une CTR de 149.77 ps FWHM. Cet écart entre les deux modélisations est dû au fait que

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

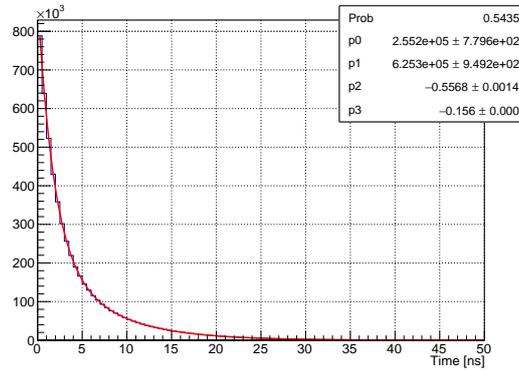


FIGURE 4.10 – Temps d'émission des photons de scintillation. Les arguments p0, p1, p2 et p3 correspondent aux paramètres A , B , $-\frac{1}{\tau_f}$ et $-\frac{1}{\tau_s}$ de l'Eq. 4.6, respectivement.

les photons Tcherenkov sont émis pratiquement instantanément lors de l'interaction du rayon gamma dans le cristal. En conséquence, les signaux aux extrémités des TL résultant de la détection d'un photon Tcherenkov par la photocathode (Figure 4.11b) sont reçus beaucoup plus rapidement que les signaux dûs à la détection d'un photon de scintillation (Figure 4.11a). Le temps global de détection de l'évènement, qui est donné par le déclenchement du discriminateur à fraction constante, sera donc plus court dans le cas d'une simulation Tcherenkov que dans le cas d'une simulation complète.

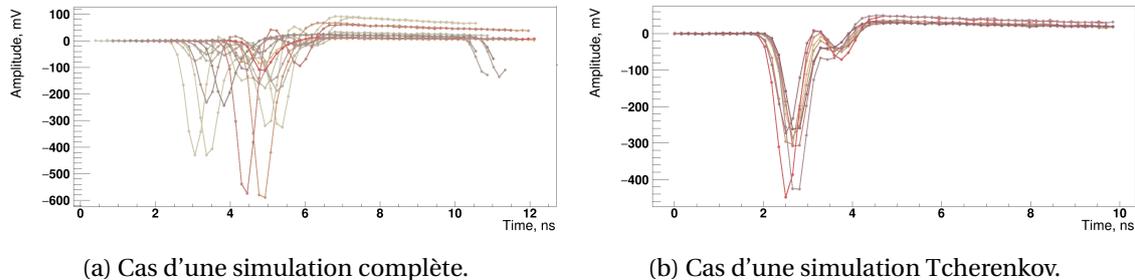


FIGURE 4.11 – Signaux reçus aux extrémités des TL du détecteur gauche, pour un des évènements de la simulation témoin (a) complète et (b) Tcherenkov uniquement du cas témoin. Chaque courbe représente le signal reçu sur une des extrémité d'une TL. Le signal est composé d'un pic principal et d'un deuxième pic résultant de la réflexion sur les connecteurs de la TL [Chi-Hsun SUNG 2022].

La CTR dépend de la dispersion de l'intervalle de temps séparant l'interaction du photon d'annihilation dans le cristal et la détection du signal. Un des meilleurs moyens d'améliorer la CTR est d'optimiser la transmittance des photons optiques du cristal à la photocathode (Figure 4.8b). De ce fait, nous obtenons une bien meilleure CTR pour

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

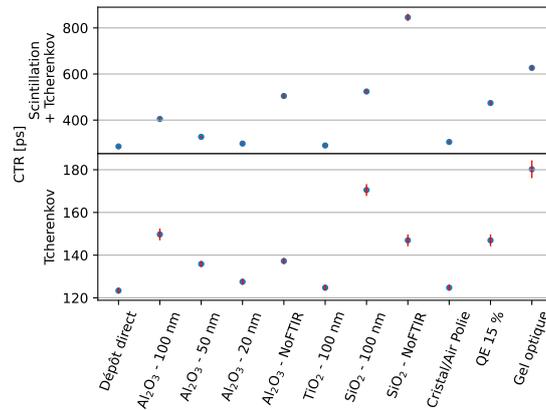


FIGURE 4.12 – CTR calculées pour tous les cas étudiés. La partie supérieure correspond à la simulation complète et la partie inférieure correspond à la simulation Tcherenkov.

les cas de dépôt direct, TiO₂ - 100 nm ou encore avec une couche mince suffisamment fine, comme pour le cas Al₂O₃ - 20 nm (Figure 4.12). À l'inverse une couche mince de SiO₂ dégrade la CTR.

La transmission frustrée joue également un rôle dans la résolution sur le temps de détection. Pour une simulation complète, les cas sans FTIR (Al₂O₃ - NoFTIR et SiO₂ - NoFTIR) donnent une CTR moins bonne que les cas avec FTIR (Al₂O₃ - 100 nm et SiO₂ - 100 nm, respectivement). La transmission frustrée permet d'améliorer la détection des photons car ils peuvent être transmis à la photocathode même si leur angle d'incidence est supérieur à l'angle limite (environ 40° dans le cas d'une couche mince de quartz et 50° dans le cas d'une couche mince d'alumine). Elle permet ainsi de minimiser la durée de leur parcours dans le cristal en diminuant la probabilité de réflexion et donc elle engendre une augmentation du nombre de photons rapides détectés. Sans la transmission frustrée (cas NoFTIR), certains photons Tcherenkov peuvent être réfléchis à l'interface. Le ratio du nombre de photons Tcherenkov détectés directement au nombre de photons de scintillation tend donc à diminuer, d'où la détérioration de la CTR.

En revanche, dans le cas d'une simulation Tcherenkov, les cas sans FTIR donnent une CTR meilleure que les cas avec FTIR. Lorsque seuls les photons Tcherenkov sont générés, la suppression de la FTIR permet de ne sélectionner que les photons émis avec un angle d'incidence faible et donc détectés avec un temps de vol court. Les autres photons Tcherenkov avec un angle d'incidence supérieur à l'angle limite sont absorbés par les faces noires ou sortent du détecteur et ne peuvent donc pas détériorer la CTR.

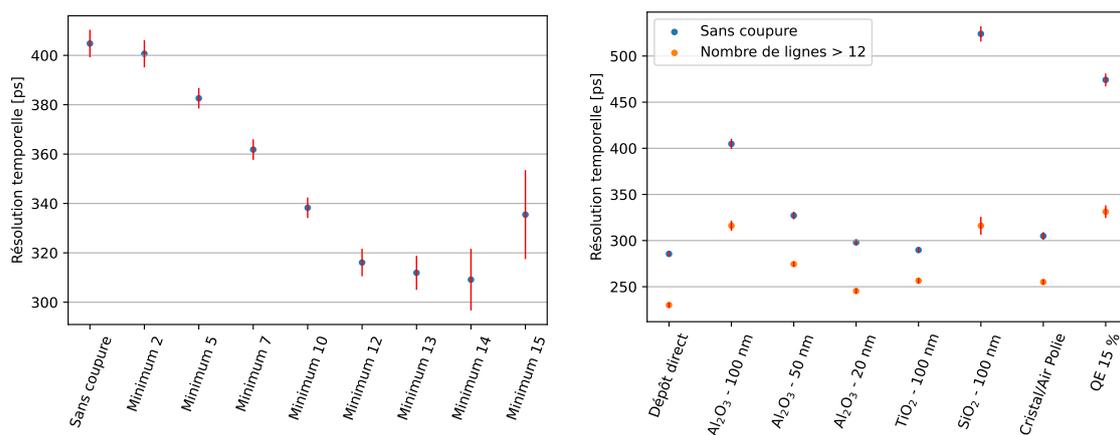
D'après la Table 4.3, le cas *cristal/air polie* donne une CTR légèrement plus élevée que le cas idéal (d'une dizaine de picosecondes), due aux multiples réflexions engendrées dans le cristal. En effet, au contact d'une surface rugueuse, l'angle réfléchi diffère de l'angle d'incidence. Ceci augmente les chances du photon d'atteindre l'inter-

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

face entre le cristal et la photocathode avec un angle d'incidence plus faible et d'être transmis, ou bien d'atteindre les faces noires au contact desquelles il sera absorbé. À l'inverse, une réflexion sur une surface polie ne modifie pas l'angle d'incidence. Le photon devra effectuer davantage de réflexions entre les deux faces du cristal avant d'être soit transmis à la photocathode, soit absorbé dans une des faces noires. Ces réflexions multiples sont en défaveur de la CTR.

Le cas QE 15 % donne une CTR environ 66 % plus élevée que le cas idéal pour une simulation complète et près de 20 % plus élevée pour une simulation Tcherenkov. Une efficacité quantique importante de la photocathode permet de prendre en compte des photoélectrons détectés rapidement et ainsi d'améliorer la CTR.

Enfin, nous constatons que la présence de gel optique entre le cristal et la photocathode détériore largement la CTR par comparaison au cas idéal ou aux simulations composées d'une couche mince. Le gel utilisé ayant un indice de réfraction très bas, il contribue au phénomène de réflexion totale et augmente ainsi le temps de détection des photons. À l'inverse, le cas idéal ne présente aucune réflexion totale et les cas étudiés qui sont composés d'une couche mince ont pour avantage d'avoir une bonne transmittance, notamment grâce au phénomène de transmission frustrée.



(a) Résolution temporelle calculée en fonction de la coupure sur le nombre minimum de TL, pour le cas témoin. (b) Comparaison entre la résolution temporelle mesurée sans coupure et lorsque le nombre minimum de TL dans chaque MCP-PMT est de 12.

FIGURE 4.13 – Démonstration de l'impact sur la CTR de la coupure sur le nombre minimum de TL.

Une manière d'améliorer la CTR est de sélectionner seulement les événements pour lesquels le nombre de TL participant à la détection des photons d'annihilation dans les deux PMT atteint un certain seuil. Lors de notre modélisation, le dépôt de 511 keV induit un signal dans une dizaine de lignes en moyenne. La Figure 4.13a présente les CTR mesurées pour le cas témoin, en fonction du nombre minimum de TL en observant un signal dans chaque MCP-PMT, ainsi que leur incertitude. Sans coupure, nous retrouvons la valeur présentée dans la Figure 4.9a de 404.8 ps FWHM.

La CTR optimale (c'est-à-dire la plus petite avec une incertitude moindre) semble être atteinte pour un nombre minimum de 12 TL. La CTR diminue alors d'environ 22 % par rapport à la CTR sans coupure sur le nombre de TL. Passé cette valeur, l'incertitude devient trop importante et la CTR augmente. À partir de 15 TL minimum, le nombre d'évènement est trop faible pour pouvoir calculer une CTR. La Table 4.2 et la Figure 4.13b montrent les CTR calculées pour chaque cas étudié, en sélectionnant seulement les évènements avec au moins 12 TL. Pour les cas Al_2O_3 - NoFTIR, SiO_2 - NoFTIR et gel optique, le nombre d'évènement correspondant est trop faible pour calculer une CTR. Pour les autres cas, on constate que la CTR est optimisée grâce à cette coupure sur le nombre de TL. Pour le cas SiO_2 - 100 nm par exemple, la CTR passe de 524.02 ± 8.32 ps FWHM à 316.08 ± 9.7 ps FWHM, soit une amélioration de presque 40 %. Le nombre de TL excitées dépend du nombre de photons détectés (Figure 4.7a). Ainsi, plus le nombre de photoélectrons est faible, plus le nombre de TL est bas en moyenne et plus la coupure sur le nombre de ligne aura un impact sur la CTR. Cependant, très peu d'évènements sont sélectionnés sur les 2.5 millions simulés (0.02 % pour le cas SiO_2 contre 0.04 % pour le cas témoin ou 0.18 % dans le cas idéal), ce qui engendre une incertitude beaucoup plus importante.

Les CTR calculées sont moins bonnes que pour certains systèmes d'imagerie cliniques, comme le Biograph Vision de Siemens, qui présente la meilleure CTR du marché de 215 ps FWHM [JIANG, CHALICH et DEEN 2019]. Malgré des constantes de temps de décroissance de l'émission rapides et l'utilisation d'un MCP-PMT, la CTR est dégradée par des phénomènes tels que la superposition des photons détectés (Figure 4.14). En effet, on constate que cette superposition impacte le signal en sortie de la TL associée, qui présente alors plusieurs pics. Cette superposition entraîne une erreur sur le calcul du temps de détection qui dépend de l'amplitude du signal. La résolution temporelle intrinsèque du détecteur se voit donc dégradée, et ainsi la CTR. Pour palier ce problème, Sung a développé dans sa thèse de doctorat, des méthodes d'apprentissage profond ou DL (pour *Deep Learning*) permettant d'optimiser la reconstruction des évènements [Chi-Hsun SUNG 2022].

Une autre manière d'améliorer la résolution temporelle serait d'instrumenter la face d'entrée du cristal grâce à des matrices SiPM, permettant ainsi de détecter les photons en limitant le nombre de réflexions multiples au sein du cristal. Ceci constituera une des prochaines étapes du projet ClearMind.

4.2.3 Résolution spatiale

Dans cette partie, nous présentons la résolution spatiale en fonction des axes x et y du détecteur représentés sur la Figure 4.1 et en sélectionnant seulement les évènements photoélectriques. La résolution selon l'axe z (c'est-à-dire selon la profondeur d'interaction) ne sera pas développée dans cette étude, mais a préalablement été discutée par Sung, qui a proposé des méthodes d'intelligence artificielle pour reconstruire la DOI [Chi-Hsun SUNG 2022].

La méthode de calcul des résolutions spatiales selon x et y sont détaillées par la suite. Nous rappelons que les anodes à l'arrière du détecteur sont reliées par des lignes de

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

	CTR sans coupure (ps) (FWHM)	CTR avec un nombre de lignes supérieures à 12 (ps) (FWHM)
Dépôt direct	285.58 ± 2.77 (0.38)	230.12 ± 2.77 (0.18)
Al ₂ O ₃ - 100 nm	404.8 ± 5.55 (0.37)	316.08 ± 5.55 (0.06)
Al ₂ O ₃ - 50 nm	327.17 ± 4.16 (0.37)	274.49 ± 2.77 (0.13)
Al ₂ O ₃ - 20 nm	298.05 ± 2.77 (0.36)	245.37 ± 2.77 (0.17)
Al ₂ O ₃ - NoFTIR	-	-
TiO ₂ - 100 nm	289.74 ± 2.77 (0.38)	256.46 ± 2.77 (0.19)
SiO ₂ - 100 nm	524.02 ± 8.32 (0.37)	316.08 ± 9.7 (0.02)
SiO ₂ - NoFTIR	-	-
Cristal/Air Polie	304.98 ± 4.16 (0.38)	255.08 ± 2.77 (0.18)
QE 15%	474.11 ± 6.93 (0.37)	331.32 ± 6.93 (0.04)
Gel optique	-	-

Tableau 4.2 – Tableaux comparatif des résolutions temporelles de la coïncidence (CTR) obtenues pour chaque cas étudié. La première colonne correspond aux CTR mesurées sans coupure sur le nombre de TL. La seconde colonne correspond aux CTR mesurées lorsque le nombre minimum de TL de chaque MCP-PMT est de 12. Le rapport du nombre d'évènements correspondant sur le nombre de coïncidence total est représentée entre parenthèse pour chaque cas étudié.

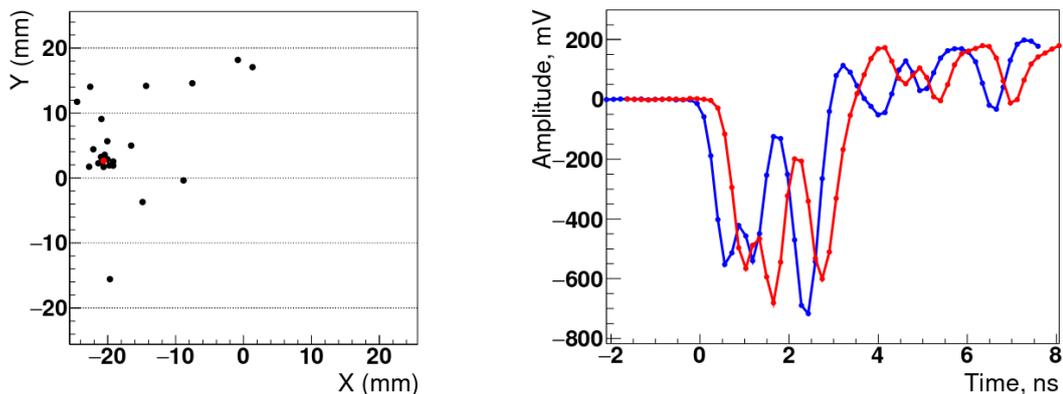
transmission (TL), qui sont orientées le long de l'axe x. La coordonnée reconstruite selon x, notée x_{reco} , dépend de la différence des temps d'arrivée du signal aux deux extrémités de la TL. Cette mesure est donc sensible au bruit et au phénomène de superposition vu précédemment. Ainsi, nous avons la coordonnée selon x de chaque photoélectron indexée par p :

$$x_p = \frac{(t_R - t_L) \times s}{2} \quad (4.8)$$

où t_R et t_L sont les temps de détection aux extrémités droite et gauche, de la TL dont l'amplitude est maximum, et s la vitesse de propagation du signal dans les TL (environ 35 % de la vitesse de la lumière). La position reconstruite selon x est obtenue en faisant la moyenne des coordonnées des photoélectrons x_p pondérée par la charge induite par sa détection, soit :

$$x_{reco} = \frac{\sum_{p=1}^n x_p C_p}{\sum_{p=1}^n C_p} \quad (4.9)$$

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation



(a) En rouge : position exacte de l'interaction du rayon gamma dans le détecteur. En noir : positions exactes des photoélectrons générés par la photocathode. (b) Signaux aux sorties droite (rouge) et gauche (bleu) de la TL 18.

FIGURE 4.14 – Illustration de la répartition spatiale des photoélectrons pour un événement [Chi-Hsun SUNG 2022].

où p le numéro du photoélectron, n le nombre total de photoélectrons et C_p la charge induite sur la TL par le photoélectron.

Verticalement, la coordonnée y_p de chaque photoélectron est calculée comme la moyenne des coordonnées de la TL présentant le maximum d'amplitude, de la TL précédente et de la TL suivante, pondérée par la charge reçue par chaque TL :

$$y_p = \frac{\sum_{k=i-1}^{i+1} y_k C_k}{\sum_{k=i-1}^{i+1} C_k} \quad (4.10)$$

avec i le numéro de la ligne ayant détecté l'amplitude maximale, et y_k et C_k la coordonnée et la charge de la $k^{\text{ème}}$ TL, respectivement. De la même manière que pour l'axe x , la position reconstruite selon y , notée y_{reco} , est obtenue en faisant la moyenne des y_p pour chaque photoélectron, pondérée par la charge de la TL.

La résolution selon x (selon y) est finalement donnée par la largeur à mi-hauteur de la distribution de la différence entre la position reconstruite x_{reco} (y_{reco}) et la position de l'interaction du photon d'annihilation dans le cristal donnée par la vérité Monte Carlo. Les distributions selon x et y sont présentées sur les Figure 4.15a et 4.15b, respectivement. Le *fit* de ces deux distributions correspond à une double gaussienne, dont la gaussienne la plus étalée correspond aux événements avec de multiples réflexions. Les distributions étant centrées en zéro ($\mu = 0$), elles suivent la loi suivante :

$$N_{double}(x) = \frac{A}{\sigma_1 \sqrt{2\pi}} \times e^{\frac{-x^2}{2\sigma_1^2}} + \frac{B}{\sigma_2 \sqrt{2\pi}} \times e^{\frac{-x^2}{2\sigma_2^2}} \quad (4.11)$$

avec A et B les paramètres d'amplitude des deux gaussiennes, et σ_1 et σ_2 les écart-type

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

des deux distributions.

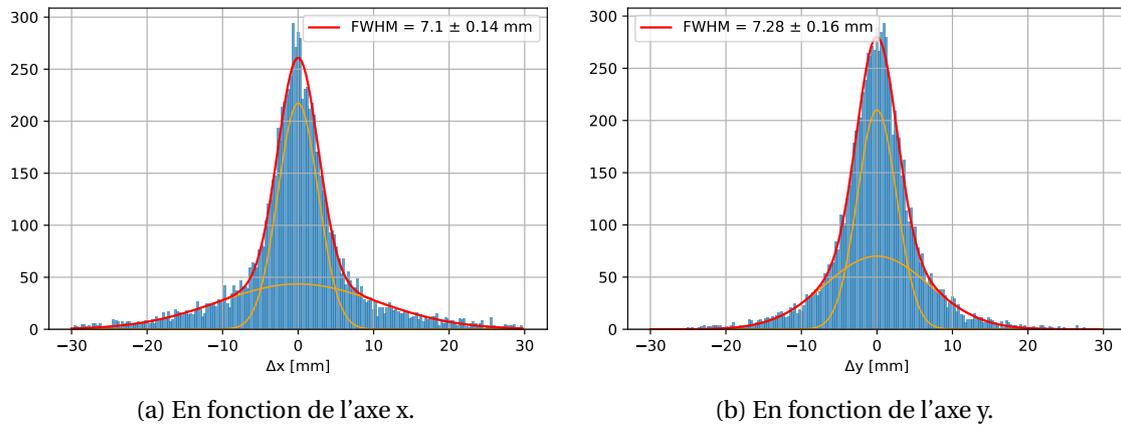


FIGURE 4.15 – Distribution de la différence entre la position reconstruite et la position de la vérité Monte Carlo, pour le cas témoin (Al_2O_3 - 100 nm) (a) selon x et (b) selon y.

Pour le cas témoin, nous obtenons une résolution spatiale selon x de 7.1 ± 0.16 mm FWHM et selon y de 7.28 ± 0.16 mm FWHM.

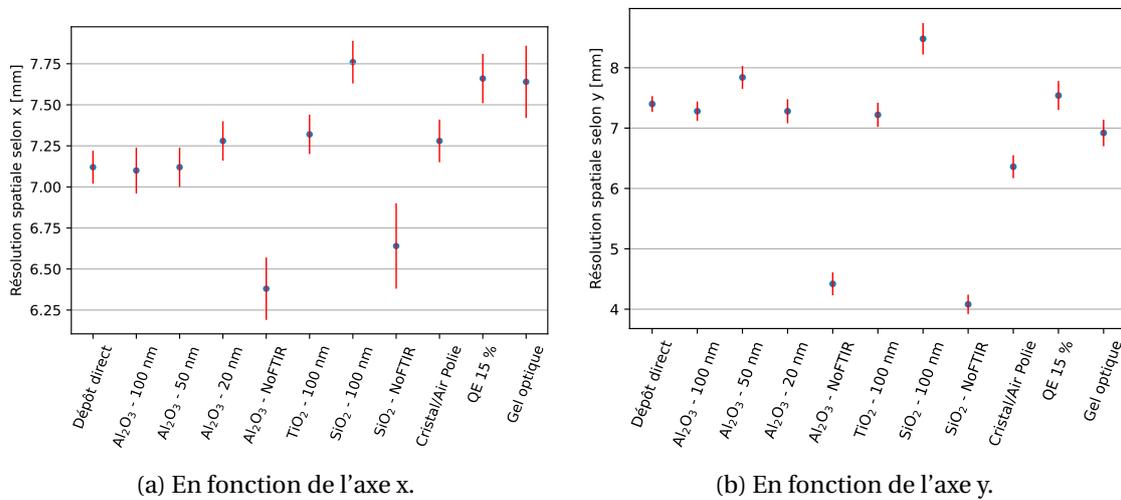


FIGURE 4.16 – Résolutions spatiales (a) selon x et (b) y pour tous les cas étudiés.

Les résolutions spatiales calculées pour tous les cas étudiés sont présentées sur les graphiques des Figures 4.16a et 4.16b et les valeurs sont listées dans la Table 4.3. On constate en premier lieu que les résolutions selon x varient peu (variation inférieure à 1 mm), excepté pour les cas sans transmission frustrée (Al_2O_3 - NoFTIR et SiO_2 - NoFTIR).

De la même manière, pour la résolution selon y, les cas sans FTIR permettent d'atteindre une résolution spatiale de l'ordre de 4 ± 0.19 mm FWHM pour le cas témoin,

soit une amélioration de 40 % dans le cas de la couche mince d'alumine et de 50 % dans le cas de la couche mince de quartz. La transmission frustrée détériore la résolution spatiale car elle permet aux photons atteignant la couche mince avec un angle d'incidence supérieur à l'angle limite d'être transmis à la photocathode et de générer un photoélectron dont le point d'émission est très éloigné du point d'interaction du rayon gamma dans le cristal. La suppression de la transmission frustrée permet donc d'augmenter la proportion de photons arrivant directement sur la couche mince avec un angle d'incidence faible.

Une variation de l'épaisseur de la couche mince d'alumine ne semble pas impacter significativement la résolution spatiale, de même qu'une couche mince de TiO_2 . En revanche, une couche mince de quartz engendre une résolution spatiale moins bonne. Nous supposons que cette détérioration est due au phénomène de transmission frustrée, bien plus présent dans le cas du SiO_2 que dans le cas de l' Al_2O_3 , en raison de son indice de réfraction plus faible, ce qui induit un angle limite entre le cristal et la couche mince de 40° contre 50° dans le cas de l'alumine.

La résolution selon x du cas QE 15 % est légèrement moins bonne que pour le cas idéal, tandis que sa résolution selon y n'est pas significativement différente. Nous supposons que cet écart est seulement dû à la statistique, qui est moins bonne pour le cas QE 15 % que pour le cas idéal (deux fois moins de photoélectrons).

Enfin, nous notons que la présence de la couche mince, ou d'un dépôt direct, n'apporte pas beaucoup plus d'information spatiale que l'utilisation de gel optique.

Les résolutions spatiales obtenues sont encore loin des attentes du projet ClearMind (environ 4 mm^3 FWHM) et sont moins bonnes que pour les systèmes d'imagerie médicale à l'état de l'art. A titre d'exemple, le Biograph Vision de Siemens [JIANG, CHALICH et DEEN 2019] bénéficie d'une résolution spatiale de l'ordre de 4 mm FWHM. Cependant la résolution spatiale peut être optimisée en utilisant les méthodes de DL [Chi-Hsun SUNG 2022] ou en instrumentant la face d'entrée du détecteur, afin de détecter les photons plutôt que de les laisser être réfléchis sur l'interface cristal/air.

4.2.4 Tableau récapitulatif

La Table 4.3 récapitule les valeurs obtenues pour toutes les résolutions (en énergie, CTR et spatiales) et leurs incertitudes pour tous les cas étudiés.

La modélisation faite dans ce chapitre n'est pas parfaitement réaliste, car les propriétés optiques des matériaux ont été tirées de la littérature et non des valeurs obtenues au chapitre 3. Néanmoins, elle nous a permis de mettre en avant l'impact des différents paramètres du détecteur, tels que l'épaisseur de la couche mince, le choix de son matériau, l'importance de la transmission frustrée ou encore l'intérêt de la

rugosité des surfaces ou de l'efficacité quantique de la photocathode. Les résolutions obtenues pour les différents cas étudiés ont été comparées à celles obtenues pour le cas idéal où la photocathode est déposée directement sur le cristal et pour le cas où le couplage optique est réalisé par un gel. Nous avons pu constater qu'une couche mince de TiO_2 nous permettrait de nous rapprocher des performances du cas idéal grâce à une transmittance optimisée des photons de scintillations et Tcherenkov en l'absence de réflexions totales. De la même manière, une couche mince suffisamment fine permettrait d'augmenter la transmittance des photons à la photocathode, notamment par transmission frustrée, et ainsi d'améliorer les performances du module de détection. En revanche, la transmission frustrée a un effet délétère sur la résolution spatiale qu'il est peut-être possible de corriger par des algorithmes d'apprentissage profond. L'utilisation de photons Tcherenkov est un réel avantage pour le module de détection ClearMind, car il permet d'améliorer sensiblement la CTR. Les résolutions obtenues grâce à la présence de la couche mince sont meilleurs que les résultats obtenus avec le gel optique, ce qui démontre l'intérêt de la couche mince mise en œuvre dans le cadre du projet ClearMind.

En conclusion, la configuration qui semble optimale pour le module de détection ClearMind est un cristal à faces polies, passivé par une couche mince de TiO_2 la plus fine possible, sur laquelle est déposée une photocathode avec une efficacité quantique d'au moins 30 % afin d'augmenter le nombre de photons de scintillation et de photons Tcherenkov détectés.

Néanmoins, les objectifs attendus en termes de CTR et de résolution spatiale par le projet ClearMind ne semblent pas accessibles. En effet, d'après la simulation, le cas idéal permettrait d'atteindre une CTR de 286 ± 3 ps FWHM, ce qui est loin de l'objectif des 100 ps FWHM attendu pour le projet ClearMind. De plus, l'efficacité quantique de la photocathode utilisée dans le cas témoin est de 30 %, alors qu'une efficacité quantique réaliste de 20 %, telle qu'estimée dans le chapitre 3, entraînerait une CTR encore moins bonne.

La détection exclusive de photons Tcherenkov permettrait de diviser la CTR par un facteur deux, ce qui constituerait une piste d'amélioration intéressante. A ce titre, Kwon *et al.* [KWON, Ryosuke OTA, BERG et al. 2021] ont réussi à obtenir une CTR de 32 ps FWHM en utilisant comme fenêtre d'entrée d'un MCP-PMT *single channel* CRI-MCP-PMT d'Hamamatsu un radiateur Tcherenkov en fluorure de plomb, sur lequel est déposée une photocathode après passivation par une couche d'oxyde d'aluminium. Dans notre cas, le faible rendement d'émission Tcherenkov (environ 20 photons pour 511 keV déposés) et l'absorption importante du cristal de PWO aux faibles longueurs d'onde, alors que le spectre d'émission des photons Tcherenkov varie en $\frac{1}{\lambda^2}$, ne nous permet pas d'envisager d'atteindre cet objectif. Un cristal de haute densité, transparent aux faibles longueurs d'onde, avec un faible rendement de scintillation et des constantes de temps de décroissance de l'émission aussi rapides que celles du PWO, mais dont l'émission Tcherenkov serait beaucoup plus importante, permettrait sans doute de se rapprocher d'une CTR de 100 ps FWHM.

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

	Résolution en énergie (%) (FWHM)	CTR (ps) (FWHM)		Résolution spatiale (mm) (FWHM)	
		Complète	Tcherenkov	selon x	selon y
Dépôt direct	49.0 ± 1.5	285.58 ± 2.77 (15.57) (0.38)	123.38 ± 1.39 (9.72) (0.19)	7.12 ± 0.1	7.4 ± 0.13
Al ₂ O ₃ - 100 nm	53.37 ± 2.9	404.80 ± 5.55 (9.78) (0.37)	149.72 ± 2.77 (7.90) (0.13)	7.1 ± 0.14	7.28 ± 0.16
Al ₂ O ₃ - 50 nm	49.46 ± 1.3	327.17 ± 4.16 (12.65) (0.37)	135.86 ± 1.39 (8.85) (0.16)	7.12 ± 0.12	7.84 ± 0.19
Al ₂ O ₃ - 20 nm	47.92 ± 1.7	298.05 ± 2.77 (14.81) (0.37)	127.54 ± 1.39 (9.55) (0.19)	7.28 ± 0.12	7.28 ± 0.2
Al ₂ O ₃ - NoFTIR	53.47 ± 3.3	504.61 ± 9.70 (7.37) (0.36)	137.24 ± 1.39 (7.09) (0.09)	6.38 ± 0.19	4.42 ± 0.19
TiO ₂ - 100 nm	47.86 ± 1.9	289.74 ± 2.77 (15.80) (0.38)	124.77 ± 1.39 (9.91) (0.19)	7.32 ± 0.12	7.22 ± 0.20
SiO ₂ - 100 nm	58.83 ± 2.8	524.02 ± 8.32 (6.99) (0.37)	170.51 ± 2.77 (6.85) (0.08)	7.76 ± 0.13	8.48 ± 0.26
SiO ₂ - NoFTIR	70.34 ± 7	845.64 ± 15.25 (4.40) (0.32)	146.95 ± 2.77 (6.04) (0.04)	6.64 ± 0.26	4.08 ± 0.16
Cristal/Air Polie	48.0 ± 1.3	304.99 ± 4.16 (15.57) (0.38)	124.77 ± 1.39 (9.83) (0.19)	7.28 ± 0.13	6.36 ± 0.19
QE 15%	61.0 ± 2.2	474.11 ± 6.93 (7.79) (0.37)	146.95 ± 2.77 (7.00) (0.09)	7.66 ± 0.15	7.54 ± 0.24
Gel optique	85.61 ± 3.5	626.61 ± 8.32 (5.21) (0.37)	180.22 ± 4.16 (7.49) (0.06)	7.54 ± 0.22	6.92 ± 0.22

Tableau 4.3 – Tableaux récapitulatif de la résolution en énergie, du CTR et des résolutions spatiales obtenues pour chaque cas étudié. Les CTR sont calculées dans le cas d’une simulation complète (émission de photons de scintillations et de photons Tcherenkov) et dans le cas d’une simulation Tcherenkov (émission de photons Tcherenkov seulement). Les deux valeurs qui suivent la CTR représentent respectivement la *fraction de photons détectés* (en %), c’est-à-dire le nombre de photons détectés sur le nombre de photons générés dans le cristal, et la *fraction d’évènements photoélectriques* (en %), c’est-à-dire le nombre d’évènements photoélectriques à l’origine d’une coïncidence (c’est-à-dire le nombre d’évènements pour lesquels les deux photons d’annihilation ont interagi par effet photoélectrique dans les cristaux de PWO), par rapport aux 2.5 millions d’évènements simulés.

Conclusion

L'objectif de ce travail de thèse était porté sur la compréhension du transport optique des photons à travers une couche de passivation dans le but de pouvoir caractériser les performances du module de détection ClearMind. La modélisation des phénomènes d'interférences et de transmission frustrée à travers une couche mince a été implémenté dans le logiciel de simulation Monte Carlo Geant4, implémentation retenue par la collaboration Geant4 qui l'a officiellement intégrée à la version 11.1 de son logiciel libéré en décembre 2022. La comparaison entre les transmittances théoriques, les mesures et les résultats obtenus par simulation Monte Carlo nous a permis de valider cette implémentation, qui a été utilisée pour modéliser le module de détection ClearMind.

Le but du projet ClearMind étant d'améliorer la résolution temporelle des détecteurs TEP, la modélisation Monte Carlo du module de détection nous a donc permis d'étudier l'objectif fixé par le projet et de fournir quelques pistes pour s'en approcher.

Le projet ClearMind préconisait d'utiliser du PWO comme milieu d'interaction en raison de sa haute densité, qui favorise l'efficacité de conversion photoélectrique des rayons gamma, mais aussi en raison de son faible rendement de scintillation, qui permet de ne pas submerger les photons Tcherenkov dont l'information temporelle est précieuse pour améliorer la résolution temporelle du module de détection. De plus, il possède de bonnes propriétés mécaniques et une bonne résistance aux hautes températures, qui est indispensable pour pouvoir déposer la photocathode sans que le cristal dégaze. Cependant, sa transparence aux longueurs d'onde inférieures à 350 nm est très faible, ce qui n'est pas favorable à la détection de photons Tcherenkov dont le spectre varie en $\frac{1}{\lambda^2}$. L'optimisation de la détection des photons aux faibles longueurs d'onde est donc primordiale.

Les photocathodes bialcalines ont une efficacité quantique optimale d'environ 20 % aux alentours de 400 nm. Cette efficacité quantique, qui est plutôt faible, est néanmoins propice à l'utilisation d'un cristal de PWO dont le rendement de scintillation est maximal à ces longueurs d'onde. De plus, les photocathodes bialcalines possèdent un coefficient d'extinction supérieur aux photocathodes multialcalines, ce qui augmente leur probabilité d'absorption des photons de scintillation et des photons Tcherenkov. Lors des premiers tests de dépôt sur des cristaux de PWO passivés par une couche d'oxyde d'aluminium, des résultats moins bons, qui ne sont pas présentés dans ce manuscrit, ont été obtenus avec des photocathodes multialcalines pour lesquelles un obscurcissement de la photocathode a été constaté. Ceci a confirmé à nouveau l'intérêt des photocathodes bialcalines pour le développement du module de détection ClearMind.

Enfin, le dépôt direct de la photocathode n'étant pas possible sans passivation du

4 Étude des performances du module de détection ClearMind par simulation Monte Carlo avec Geant4 – 4.2 Résolutions en fonction des paramètres de la modélisation

PWO pour prévenir son oxydation, le choix du matériau de la couche de passivation, ainsi que son épaisseur, constituent un des axes de recherche et de développement principaux dans le cadre du projet ClearMind. D'après les résultats des modélisations décrites dans le Chapitre 4, un matériau dont l'indice de réfraction est compris entre celui du cristal et celui de la photocathode, comme par exemple le dioxyde de titane, permettrait de faciliter le transport des photons à travers la couche mince pour les angles d'incidence importants. La comparaison entre la modélisation à partir d'une couche de passivation d'oxyde d'aluminium et d'une couche d'oxyde de titane montre une amélioration de 28 % de la CTR. Cependant, le dépôt de l'oxyde de titane sur le cristal s'avère compliqué puisqu'une délamination de la couche mince est observée. De plus, une faible épaisseur permet d'optimiser significativement la transmittance, notamment grâce à la transmission frustrée. Ainsi, le passage d'une épaisseur de 20 à 100 nm détériore de 26 % la CTR. Cependant, la couche de passivation doit être suffisamment épaisse pour protéger la photocathode, ce qui constitue un obstacle à l'optimisation de la transmittance.

Parmi les photodétecteurs, le MCP-PMT est un excellent candidat pour obtenir une bonne résolution temporelle du fait du temps de transit très court des électrons. Une des prochaines étapes du projet ClearMind est d'instrumenter également la face avant du cristal avec des matrices de SiPM, ce qui diminuera le nombre de réflexions multiples et permettra ainsi d'améliorer les résolutions spatiale et possiblement temporelle, compte tenu de leur bonne résolution temporelle intrinsèque.

Les résolutions obtenues dans le cas des cristaux passivés par une couche mince sont meilleures que lorsque le cristal et la photocathode sont couplés par un gel optique, ce qui est de bon augure pour le projet ClearMind. Bien que les résolutions obtenues par modélisation soient encourageantes, il semble néanmoins compliqué d'atteindre une résolution volumique inférieure à 4 mm^3 FWHM et une CTR inférieure à 100 ps FWHM avec un cristal de PWO.

L'utilisation d'un autre matériau d'interaction dont la composition chimique n'altérerait pas la photocathode serait une panacée. Quoi qu'il en soit, la détection des photons Tcherenkov, qui permet d'améliorer significativement la CTR, est incontournable. Un cristal avec un rendement d'émission Tcherenkov plus important et qui soit plus transparent aux faibles longueurs d'onde est donc la voie à privilégier pour améliorer la CTR tout en conservant une information en énergie et une résolution spatiale suffisante.

Bibliographie

- [Ago+03] S. AGOSTINELLI, J. ALLISON, K. AMAKO et al. « Geant4—a simulation toolkit ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 506.3 (1^{er} juil. 2003), p. 250-303. ISSN : 0168-9002. DOI : [10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688> (visité le 31/03/2023) (cf. p. 62, 82).
- [Akc+09] N. AKCHURIN, F. BEDESCHI, A. CARDINI et al. « New crystals for dual-readout calorimetry ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 604.3 (juin 2009), p. 512-526. ISSN : 01689002. DOI : [10.1016/j.nima.2009.03.101](https://doi.org/10.1016/j.nima.2009.03.101). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168900209004343> (visité le 12/04/2023) (cf. p. 93).
- [AKL02] A.A ANNENKOV, M.V KORZHIK et P LECOQ. « Lead tungstate scintillation material ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 490.1 (sept. 2002), p. 30-50. ISSN : 01689002. DOI : [10.1016/S0168-9002\(02\)00916-6](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(02)00916-6). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168900202009166> (visité le 28/09/2022) (cf. p. 56, 68, 74, 93, 110).
- [Bac+95] S BACCARO, L M BARONE, B BORGIA et al. *Optical properties of lead tungstate (PbWO₄) crystal for LHC em-calorimetry*. 1995 (cf. p. 55, 73, 90).
- [Bac+97] S. BACCARO, L. M. BARONE, B. BORGIA et al. « Ordinary and extraordinary complex refractive index of the lead tungstate (PbWO₄) crystal ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 385.2 (21 jan. 1997), p. 209-214. ISSN : 0168-9002. DOI : [10.1016/S0168-9002\(96\)01016-9](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(96)01016-9). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900296010169> (visité le 29/03/2023) (cf. p. 93).
- [Bar+17] A.Yu. BARNYAKOV, M.Yu. BARNYAKOV, D.A. CYGANKOV et al. « Measurement of the photoelectron collection efficiency in MCP PMT ». In : *J. Inst.* 12.3 (27 mar. 2017), P03027-P03027. ISSN : 1748-0221. DOI : [10.1088/1748-0221/12/03/P03027](https://doi.org/10.1088/1748-0221/12/03/P03027). URL : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1748-0221/12/03/P03027> (visité le 28/09/2022) (cf. p. 45).
- [Ber15] Arnaud BERTRAND. « Mise en place de l'imagerie Cerenkov 3D ». These de doctorat. Strasbourg, 6 nov. 2015. URL : <https://www.theses.fr/2015STRAE020> (visité le 06/10/2022) (cf. p. 40).

- [Bor+99] Max BORN, Emil WOLF, A. B. BHATIA et al. *Principles of Optics : Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. 7e édition. Cambridge; New York : Cambridge University Press, 13 oct. 1999. 985 p. ISBN : 978-0-521-64222-4 (cf. p. 24, 35, 37).
- [Bre+16] D. BRETON, V. DE CACQUERAY, E. DELAGNES et al. « Measurements of timing resolution of ultra-fast silicon detectors with the SAMPIC waveform digitizer ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 835 (nov. 2016), p. 51-60. ISSN : 01689002. DOI : [10.1016/j.nima.2016.08.019](https://doi.org/10.1016/j.nima.2016.08.019). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168900216308373> (visité le 10/01/2023) (cf. p. 58, 112).
- [Buc07] Jed Z. BUCHWALD. « Huygens' Methods for Determining Optical Parameters in Birefringence ». In : *Arch. Hist. Exact Sci.* 61.1 (jan. 2007), p. 67-81. ISSN : 0003-9519, 1432-0657. DOI : [10.1007/s00407-006-0115-7](https://doi.org/10.1007/s00407-006-0115-7). URL : <http://link.springer.com/10.1007/s00407-006-0115-7> (visité le 12/04/2023) (cf. p. 96).
- [Can+17] C. CANOT, M. ALOKHINA, P. ABBON et al. « Development of the fast and efficient gamma detector using Cherenkov light for TOF-PET ». In : *J. Inst.* 12.12 (déc. 2017). Publisher : IOP Publishing, p. C12029-C12029. ISSN : 1748-0221. DOI : [10.1088/1748-0221/12/12/C12029](https://doi.org/10.1088/1748-0221/12/12/C12029). URL : <https://doi.org/10.1088/1748-0221/12/12/c12029> (visité le 04/10/2022) (cf. p. 55).
- [Can18] Clotilde CANOT. « Détecteur optique Cherenkov de photons 511 keV, rapide et efficace, pour l'imagerie TEP ». These de doctorat. 2018 (cf. p. 41).
- [Cap+21] L. CAPPELLUGOLA, S. CURTONI, M. DUPONT et al. « Modelisation of Light Transmission through Surfaces with Thin Film Optical Coating in Geant4 ». In : *2021 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference (NSS/MIC)*. Piscataway, NJ, USA : IEEE, 16 oct. 2021, p. 1-5. ISBN : 978-1-66542-113-3. DOI : [10.1109/NSS/MIC44867.2021.9875513](https://doi.org/10.1109/NSS/MIC44867.2021.9875513). URL : <https://ieeexplore.ieee.org/document/9875513/> (visité le 27/09/2022) (cf. p. 55, 57).
- [Čer37] P. A. ČERENKOV. « Visible Radiation Produced by Electrons Moving in a Medium with Velocities Exceeding that of Light ». In : *Phys. Rev.* 52.4 (15 août 1937), p. 378-379. ISSN : 0031-899X. DOI : [10.1103/PhysRev.52.378](https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.378). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.378> (visité le 06/01/2023) (cf. p. 40).
- [CF11] M. J. CHARLES et R. FORTY. « TORCH : Time of flight identification with Cherenkov radiation ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. Proceedings of the Seventh International Workshop on Ring Imaging Cherenkov Detectors 639.1 (21 mai 2011), p. 173-176. ISSN : 0168-9002. DOI : [10.1016/j.nima.2010.09.021](https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.09.021). URL : <https://www.>

- [sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900210020140](https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900210020140) (visité le 06/01/2023) (cf. p. 45).
- [Chi95] Rémi CHIPAUX. *Numerical formulae for the refractive index of lead tungstate*. 1995, p. 5 (cf. p. 55, 73, 89, 91, 95).
- [Cla17] Savannah CLAWSON. *Investigating the temperature dependence of photo-multiplier quantum efficiency when operating in the visible spectrum*. 2017 (cf. p. 44).
- [CFT65] P. COLOMBINO, B. FISCELLA et L. TROSSI. « Study of positronium in water and ice from 22 to -144 °C by annihilation quanta measurements ». In : *Nuovo Cim* 38.2 (1^{er} juil. 1965), p. 707-723. ISSN : 1827-6121. DOI : [10.1007/BF02748591](https://doi.org/10.1007/BF02748591). URL : <https://doi.org/10.1007/BF02748591> (visité le 11/01/2023) (cf. p. 49).
- [Cur20] Sebastien CURTONI. « Développement d'un démonstrateur d'hodoscope faisceau en diamant pour le contrôle en ligne du parcours des ions en hadronthérapie ». These de doctorat. 2020, p. 283 (cf. p. 54).
- [Dau+20] Denis DAUVERGNE, Oreste ALLEGRINI, Cairo CAPLAN et al. « On the Role of Single Particle Irradiation and Fast Timing for Efficient Online-Control in Particle Therapy ». In : *Front. Phys.* 8 (7 oct. 2020), p. 567215. ISSN : 2296-424X. DOI : [10.3389/fphy.2020.567215](https://doi.org/10.3389/fphy.2020.567215). URL : <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fphy.2020.567215/full> (visité le 10/01/2023) (cf. p. 54).
- [DIG22] S. DELICE, M. ISIK et N.M. GASANLY. « Investigation of linear and nonlinear optical properties of PbWO₄ single crystal ». In : *Optical Materials* 133 (nov. 2022), p. 113025. ISSN : 09253467. DOI : [10.1016/j.optmat.2022.113025](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.113025). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S092534672201062X> (visité le 12/04/2023) (cf. p. 93).
- [DV96] P. DORENBOS et C. W. E. VAN EIJK, éd. *Proceedings, International Conference on Inorganic Scintillators and their Applications (SCINT 95) : Delft, The Netherlands, August 28-September 1, 1995*. Delft : Delft University Press, 1996 (cf. p. 55).
- [Dre+04] O. de DREUILLE, P. MASZELIN, H. FOEHRENBACH et al. « Principe et technique de la tomographie par émission de positons (TEP) ». In : *EMC - Radiologie* 1.1 (fév. 2004), p. 2-35. ISSN : 17624185. DOI : [10.1016/j.emcrad.2003.12.001](https://doi.org/10.1016/j.emcrad.2003.12.001). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1762418503000062> (visité le 07/10/2022) (cf. p. 48).
- [Els] ELSAN. *Spécialités | Centre de Médecine Nucléaire et TEP Paris Nord | SENY*. URL : <https://medecinenucleaire-tep-sarcelles.fr/fr/specialites/tomographie-par-emission-de-positons-tep-scanner/> (visité le 09/01/2023) (cf. p. 49).

- [Fol+22] M. FOLLIN, R. CHYZH, C-H. SUNG et al. « High resolution MCP-PMT readout using transmission lines ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 1027 (11 mar. 2022), p. 166092. ISSN : 0168-9002. DOI : [10.1016/j.nima.2021.166092](https://doi.org/10.1016/j.nima.2021.166092). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900221010044> (visité le 04/10/2022) (cf. p. 45).
- [Fol+21] M. FOLLIN, V. SHARYY, J-P. BARD et al. « Scintillating properties of today available lead tungstate crystals ». In : *Journal of Instrumentation* 16.8 (2021). Publisher : IOP Publishing, P08040. DOI : [10.1088/1748-0221/16/08/P08040](https://doi.org/10.1088/1748-0221/16/08/P08040). URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03197498> (visité le 04/10/2022) (cf. p. 57, 82, 110).
- [Fol20] Megane FOLLIN. « Détecteur pour l'imagerie TEP, temps de vol et haute résolution spatiale ». These de doctorat. 2020 (cf. p. 39, 46, 58).
- [Gar98] C. GARING. *Ondes., 2, Ondes électromagnétiques, exercices ... - Christian Garing - ELLIPSES*. 1998. URL : <https://www.leslibraires.fr/livre/322395-ondes-2-ondes-electromagnetiques-exercices--christian-garing-ellipses> (visité le 28/09/2022) (cf. p. 24).
- [HHT00] S HALLENSLEBEN, S.W HARMER et P.D TOWNSEND. « Optical constants for the S20 photocathode, and their application to increasing photomultiplier quantum efficiency ». In : *Optics Communications* 180.1 (juin 2000), p. 89-102. ISSN : 00304018. DOI : [10.1016/S0030-4018\(00\)00694-5](https://doi.org/10.1016/S0030-4018(00)00694-5). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0030401800006945> (visité le 27/09/2022) (cf. p. 76-78).
- [Ham07] HAMAMATSU. *Photomultiplier Tubes*. 2007, p. 22 (cf. p. 45, 104).
- [Har+06] S.W. HARMER, R. DOWNEY, Y. WANG et al. « Variation in optical constants between photocathodes ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 564.1 (août 2006), p. 439-450. ISSN : 01689002. DOI : [10.1016/j.nima.2006.04.050](https://doi.org/10.1016/j.nima.2006.04.050). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168900206006954> (visité le 27/09/2022) (cf. p. 62, 67, 68, 77, 78, 84, 104, 105).
- [HS07] Yanlin HUANG et Hyo Jin SEO. « Luminescence Properties and Refractive-Index Characterization of Li+-Doped PbWO4 Single Crystals ». In : *J. Korean Phys. Soc.* 50.2 (15 fév. 2007), p. 493. ISSN : 0374-4884. DOI : [10.3938/jkps.50.493](https://doi.org/10.3938/jkps.50.493). URL : http://www.kps.or.kr/jkps/abstract_view.asp?articleid=C873BDB0-DAFA-4B4F-853F-771D76A6A7C1 (visité le 27/09/2022) (cf. p. 55, 56, 62, 68, 73, 89, 90, 107, 110).
- [Ima] Clínica Mult IMAGEM. *Pet CT / Pet Scan*. URL : <https://www.multimagem.med.br/pet-ct-pet-scan.asp> (visité le 09/01/2023) (cf. p. 49).

- [Jac+21] Maxime JACQUET, Sara MARCATILI, Marie-Laure GALLIN-MARTEL et al. « A Time-Of-Flight-Based Reconstruction for Real-Time Prompt-Gamma Imaging in Protontherapy ». In : *Phys. Med. Biol.* 66.13 (7 juil. 2021), p. 135003. ISSN : 0031-9155, 1361-6560. DOI : [10.1088/1361-6560/ac03ca](https://doi.org/10.1088/1361-6560/ac03ca). arXiv : [2012.09275\[physics\]](https://arxiv.org/abs/2012.09275). URL : <http://arxiv.org/abs/2012.09275> (visité le 29/09/2022) (cf. p. 54).
- [Jel55] J. V. JELLEY. « Cerenkov radiation and its applications ». In : *Br. J. Appl. Phys.* 6.7 (juil. 1955). Publisher : IOP Publishing, p. 227-232. ISSN : 0508-3443. DOI : [10.1088/0508-3443/6/7/301](https://doi.org/10.1088/0508-3443/6/7/301). URL : <https://doi.org/10.1088/0508-3443/6/7/301> (visité le 06/10/2022) (cf. p. 40).
- [Jel+12] G. E. JELLISON, L. A. BOATNER, J. O. RAMEY et al. « Refractive index of sodium iodide ». In : *Journal of Applied Physics* 111.4 (15 fév. 2012), p. 043521. ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : [10.1063/1.3689746](https://doi.org/10.1063/1.3689746). URL : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3689746> (visité le 09/01/2023) (cf. p. 39).
- [JCD19] Wei JIANG, Yamn CHALICH et M. Jamal DEEN. « Sensors for Positron Emission Tomography Applications ». In : *Sensors (Basel)* 19.22 (17 nov. 2019), p. 5019. ISSN : 1424-8220. DOI : [10.3390/s19225019](https://doi.org/10.3390/s19225019). URL : <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6891456/> (visité le 21/12/2022) (cf. p. 116, 124, 128).
- [Kno00] Glenn F. KNOLL. *Radiation detection and measurement*. en. 3rd ed. New York : Wiley, 2000. ISBN : 978-0-471-07338-3 (cf. p. 26, 43, 46).
- [Kri+18] J. KRIMMER, D. DAUVERGNE, J.M. LÉTANG et al. « Prompt-gamma monitoring in hadrontherapy : A review ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 878 (jan. 2018), p. 58-73. ISSN : 01689002. DOI : [10.1016/j.nima.2017.07.063](https://doi.org/10.1016/j.nima.2017.07.063). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168900217308380> (visité le 10/01/2023) (cf. p. 53).
- [Kri09] Peter KRIŽAN. « Advances in particle-identification concepts ». In : *J. Inst.* 4.11 (25 nov. 2009), P11017-P11017. ISSN : 1748-0221. DOI : [10.1088/1748-0221/4/11/P11017](https://doi.org/10.1088/1748-0221/4/11/P11017). URL : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1748-0221/4/11/P11017> (visité le 13/03/2023) (cf. p. 111).
- [Kuh+06] A. KUHN, S. SURTI, J.S. KARP et al. « Performance assessment of pixelated LaBr/sub 3/ detector modules for time-of-flight PET ». In : *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 53.3 (juin 2006), p. 1090-1095. ISSN : 0018-9499. DOI : [10.1109/TNS.2006.873708](https://doi.org/10.1109/TNS.2006.873708). URL : <http://ieeexplore.ieee.org/document/1645000/> (visité le 10/01/2023) (cf. p. 52).
- [Kwo+21] Sun Il KWON, Ryosuke OTA, Eric BERG et al. « Ultrafast timing enables reconstruction-free positron emission imaging ». In : *Nat. Photon.* 15.12 (déc. 2021). Number : 12 Publisher : Nature Publishing Group, p. 914-918. ISSN : 1749-4893. DOI : [10.1038/s41566-021-00871-2](https://doi.org/10.1038/s41566-021-00871-2). URL :

- <https://www.nature.com/articles/s41566-021-00871-2> (visité le 28/09/2022) (cf. p. 53, 129).
- [Lec09] Roger LECOMTE. « Novel detector technology for clinical PET ». In : *Eur J Nucl Med Mol Imaging* 36 (S1 mar. 2009), p. 69-85. ISSN : 1619-7070, 1619-7089. DOI : [10.1007/s00259-008-1054-0](https://doi.org/10.1007/s00259-008-1054-0). URL : <http://link.springer.com/10.1007/s00259-008-1054-0> (visité le 04/10/2022) (cf. p. 39, 50, 52).
- [Lec06] P. LECOQ, éd. *Inorganic scintillators for detector systems : physical principles and crystal engineering*. Particle acceleration and detection. Berlin; New York : Springer, 2006. 251 p. ISBN : 978-3-540-27766-8 (cf. p. 39).
- [LMP20] Paul LECOQ, Christian MOREL et John PRIOR. « Case for setting up a 10ps challenge : A step toward reconstruction-less TOF-PET ». In : *Il Nuovo Cimento C* 43.1 (26 mai 2020), p. 1-7. ISSN : 03905551, 03905551. DOI : [10.1393/ncc/i2020-20002-y](https://doi.org/10.1393/ncc/i2020-20002-y). URL : <https://doi.org/10.1393/ncc/i2020-20002-y> (visité le 27/09/2022) (cf. p. 53).
- [MZ93] Da-an MA et Ren-yuan ZHU. « Light attenuation length of barium fluoride crystals ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*.333 (1993), p. 422-424 (cf. p. 93).
- [Mal65] I. H. MALITSON. « Interspecimen Comparison of the Refractive Index of Fused Silica*,† ». In : *J. Opt. Soc. Am., JOSA* 55.10 (1^{er} oct. 1965). Publisher : Optica Publishing Group, p. 1205-1209. DOI : [10.1364/JOSA.55.001205](https://doi.org/10.1364/JOSA.55.001205). URL : <https://opg.optica.org/josa/abstract.cfm?uri=josa-55-10-1205> (visité le 30/01/2023) (cf. p. 62).
- [MZZ07] Rihua MAO, Liyuan ZHANG et Ren-Yuan ZHU. « Optical and Scintillation Properties of Inorganic Scintillators in High Energy Physics ». In : *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record* (2007) (cf. p. 39).
- [MM71] A G MATHEWSON et H P MYERS. « Absolute Values of the Optical Constants of Some Pure Metals ». In : *Phys. Scr.* 4.6 (1^{er} déc. 1971), p. 291-292. ISSN : 0031-8949, 1402-4896. DOI : [10.1088/0031-8949/4/6/009](https://doi.org/10.1088/0031-8949/4/6/009). URL : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0031-8949/4/6/009> (visité le 19/04/2023) (cf. p. 98).
- [Meh21] Brahim MEHADJI. « Modélisation Monte Carlo d'une caméra Compton basée sur l'utilisation de détecteurs à scintillation sensibles à la position couplés à des SIPM ». These de doctorat. Aix-Marseille, 28 mai 2021. URL : <https://www.theses.fr/2021AIXM0212> (visité le 28/09/2022) (cf. p. 43, 53).
- [Min+01] Shao MING, Chen HONG-FANG, Li CHENG et al. « Scintillation Characteristics of Doped PbWO Crystals ». In : *Chinese Phys. Lett.* 18.4 (mar. 2001). Publisher : IOP Publishing, p. 513-515. ISSN : 0256-307X. DOI : [10.1088/0256-307X/18/4/315](https://doi.org/10.1088/0256-307X/18/4/315). URL : <https://doi.org/10.1088/0256-307X/18/4/315> (visité le 05/10/2022) (cf. p. 56, 57, 110).

- [Mos11] William W. MOSES. « Fundamental Limits of Spatial Resolution in PET ». In : *Nucl Instrum Methods Phys Res A* 648 Supplement 1 (21 août 2011), S236-S240. ISSN : 0168-9002. DOI : [10.1016/j.nima.2010.11.092](https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.11.092). URL : <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3144741/> (visité le 28/09/2022) (cf. p. 49).
- [Mos+06] M. MOSZYNSKI, M. KAPUSTA, A. NASSALSKI et al. « New Prospects for Time-of-Flight PET With LSO Scintillators ». In : *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 53.5 (oct. 2006), p. 2484-2488. ISSN : 0018-9499. DOI : [10.1109/TNS.2006.875999](https://doi.org/10.1109/TNS.2006.875999). URL : <http://ieeexplore.ieee.org/document/1710226/> (visité le 10/01/2023) (cf. p. 52).
- [MS05] D. MOTTA et S. SCHÖNERT. « Optical properties of bialkali photocathodes ». In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 539.1 (21 fév. 2005), p. 217-235. ISSN : 0168-9002. DOI : [10.1016/j.nima.2004.10.009](https://doi.org/10.1016/j.nima.2004.10.009). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900204022132> (visité le 28/09/2022) (cf. p. 44, 76-79, 82, 85, 107, 111, 113).
- [Nag23] NAGWA. *Diodes Semi-conductrices*. 2023. URL : <https://www.nagwa.com/fr/explainers/128152463062/> (visité le 06/01/2023) (cf. p. 42).
- [Ota+21] R. OTA, K. NAKAJIMA, I. OGAWA et al. « Lead-free MCP to improve coincidence time resolution and reduce MCP direct interactions ». In : *Phys Med Biol* 66.6 (17 mar. 2021), p. 064006. ISSN : 1361-6560. DOI : [10.1088/1361-6560/abea2c](https://doi.org/10.1088/1361-6560/abea2c) (cf. p. 45).
- [Pey19] Jean PEYRÉ. « Scintillateurs & détecteurs de lumière ». In : *CSNSM* (2019). URL : <http://www.csnsm.in2p3.fr> (cf. p. 43).
- [Phoa] Hamamatsu PHOTONICS. *Photomultiplier tube R580*. URL : https://www.hamamatsu.com/eu/en/product/optical-sensors/pmt/pmt_tube-alone/head-on-type/R580.html (visité le 06/01/2023) (cf. p. 44).
- [Phob] Hamamatsu PHOTONICS. *Si PIN photodiode S5973*. URL : <https://www.hamamatsu.com/eu/en/product/optical-sensors/photodiodes/si-photodiodes/S5973.html> (visité le 06/01/2023) (cf. p. 42).
- [Phoc] PHOTONIS. *MCP-PMT*. Photonis. URL : <https://www.photonis.com/products/mcp-pmt> (visité le 06/01/2023) (cf. p. 46).
- [Phod] PHOTONIS. *Planacon*. Photonis. URL : <https://www.photonis.com/products/planacon> (visité le 05/10/2022) (cf. p. 55).
- [Pol] Mikhail N. POLYANSKIY. *Refractive index database*. URL : <https://refractiveindex.info> (visité le 21/04/2023) (cf. p. 39, 62).
- [PI21] Véronique PUILL et Jtd IN. *Introduction sur les principaux photodétecteurs*. 2021, p. 17 (cf. p. 43, 45, 46).

- [RC13] Emilie RONCALI et Simon R. CHERRY. « Simulation of light transport in scintillators based on 3D characterization of crystal surfaces ». In : *Phys. Med. Biol.* 58.7 (mar. 2013). Publisher : IOP Publishing, p. 2185. ISSN : 0031-9155. DOI : [10.1088/0031-9155/58/7/2185](https://doi.org/10.1088/0031-9155/58/7/2185). URL : <https://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/58/7/2185> (visité le 09/11/2022) (cf. p. 82).
- [Shi] Inter-Connector MT-type SHIN-ETSU POLYMER. Shin-Etsu Polymer Europe B.V. URL : <https://www.shinetsu.info/product/mt-type-of-inter-connector/> (visité le 13/03/2023) (cf. p. 112).
- [Slu+19] Joyce van SLUIS, Johan de JONG, Jenny SCHAAR et al. « Performance Characteristics of the Digital Biograph Vision PET/CT System ». In : *J Nucl Med* 60.7 (juil. 2019), p. 1031-1036. ISSN : 1535-5667. DOI : [10.2967/jnumed.118.215418](https://doi.org/10.2967/jnumed.118.215418) (cf. p. 51).
- [Sun+23] C.-H. SUNG, L. CAPPELLUGOLA, M. FOLLIN et al. « Detailed simulation for the ClearMind prototype detection module and event reconstruction using artificial intelligence ». en. In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 1053 (mai 2023), p. 168357. ISSN : 01689002. DOI : [10.1016/j.nima.2023.168357](https://doi.org/10.1016/j.nima.2023.168357). URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168900223003479> (visité le 07/06/2023) (cf. p. 22, 55, 108, 112).
- [Sun22] Chi-Hsun SUNG. « Simulation and Artificial Intelligence for a Gamma-Detector for High Resolution PET Imaging ». These de doctorat. 2022 (cf. p. 22, 46, 55, 108, 110, 112, 113, 121, 124, 126, 128).
- [Ter+82] Michel M TER-POGOSSIAN, David C FICKE, Mikio YAMAMOTO et al. « Super PETT 1 : A Positron Emission Tomograph Utilizing Photon Time-of-Flight Information ». In : *IEEE TRANSACTIONS ON MEDICAL IMAGING* MI-1.3 (1982) (cf. p. 52).
- [the16] THECURIOUSASTRONOMER. *Frank-Tamm formula*. thecuriousastronomer. 2016. URL : <https://thecuriousastronomer.wordpress.com/tag/frank-tamm-formula/> (visité le 06/01/2023) (cf. p. 41).
- [Thi21] C THIBAULT. « Vers une mesure de l'efficacité quantique des photocathodes ». In : (9 juil. 2021) (cf. p. 101).
- [TNE74] R. W. TODD, J. M. NIGHTINGALE et D. B. EVERETT. « A proposed camera ». In : *Nature* 251.5471 (sept. 1974). Number : 5471 Publisher : Nature Publishing Group, p. 132-134. ISSN : 1476-4687. DOI : [10.1038/251132a0](https://doi.org/10.1038/251132a0). URL : <https://www.nature.com/articles/251132a0> (visité le 03/10/2022) (cf. p. 53).
- [Vig03] Jean-Marie VIGOUREUX. « De l'onde évanescente de Fresnel au champ proche optique ». In : *Annales de la Fondation Louis de Broglie* 28.3 (2003) (cf. p. 36).

- [Wil+96] P A WILLIAMS, A H ROSE, K S LEE et al. « Optical, thermo-optic, electro-optic, and photoelastic properties of bismuth germanate $\text{ABi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}\text{B}$ ». In : *APPLIED OPTICS* 35.19 (1996) (cf. p. 39).
- [XCO] XCOM. *XCOM : Photon Cross Sections Data*. URL : https://physics.nist.gov/cgi-bin/Xcom/xcom3_2 (visité le 03/01/2023) (cf. p. 26).
- [Xie+20] Siwei XIE, Xi ZHANG, Yibin ZHANG et al. « Evaluation of Various Scintillator Materials in Radiation Detector Design for Positron Emission Tomography (PET) ». In : *Crystals* 10.10 (25 sept. 2020), p. 869. ISSN : 2073-4352. DOI : [10.3390/cryst10100869](https://doi.org/10.3390/cryst10100869). URL : <https://www.mdpi.com/2073-4352/10/10/869> (visité le 12/01/2023) (cf. p. 51).
- [Yvo+14] D. YVON, J.-Ph. RENAULT, G. TAUZIN et al. « CaLIPSO : An Novel Detector Concept for PET Imaging ». In : *IEEE Transactions on Nuclear Science* 61.1 (fév. 2014). Conference Name : IEEE Transactions on Nuclear Science, p. 60-66. ISSN : 1558-1578. DOI : [10.1109/TNS.2013.2291971](https://doi.org/10.1109/TNS.2013.2291971) (cf. p. 55).
- [Yvo+20] D. YVON, V. SHARYY, M. FOLLIN et al. « Design study of a “scintronic” crystal targeting tens of picoseconds time resolution for gamma ray imaging : the ClearMind detector ». In : *Journal of Instrumentation* 15.7 (2020). Publisher : IOP Publishing, P07029. DOI : [10.1088/1748-0221/15/07/P07029](https://doi.org/10.1088/1748-0221/15/07/P07029). URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02899246> (visité le 05/10/2022) (cf. p. 21, 54, 56).