

掺碲液闪闪烁光淬灭机制的讨论

梁晔

清华大学 工程物理系 近代物理研究所

liang-ye@mail.tsinghua.edu.cn



清华大学
Tsinghua University



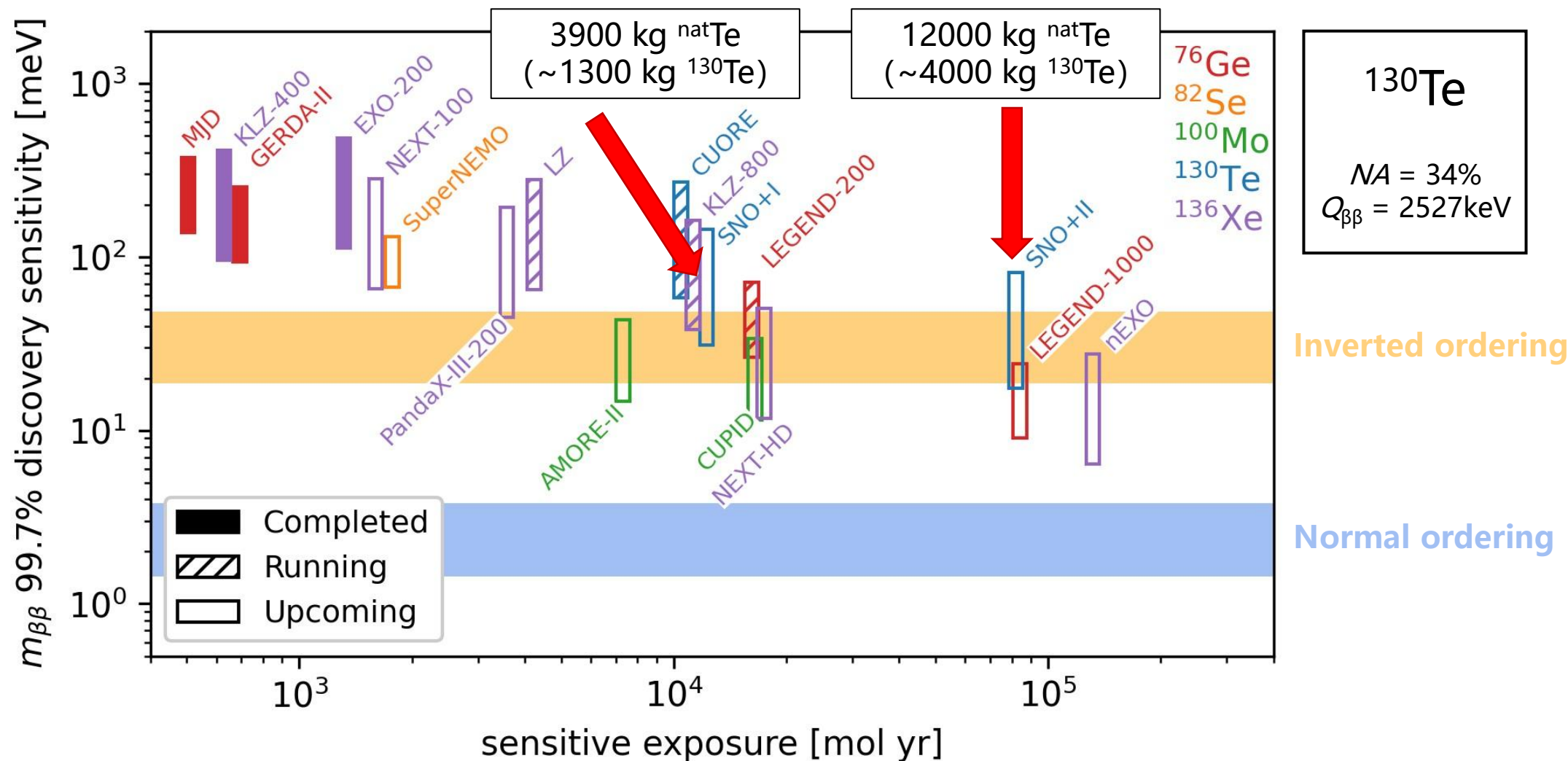
CJPL



JINPING
NEUTRINO
EXPERIMENT

JNE Workshop 2026 · 中国西昌

掺碲液闪与 $0\nu\beta\beta$ 探测



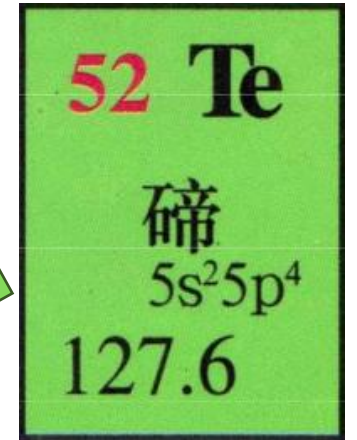
掺碲液闪与 $0\nu\beta\beta$ 探测

项目	SNO+ I	SNO+ II	JUNO $0\nu\beta\beta$ baseline
天然Te含量	0.5 wt%	1.5 wt%	3 wt%
^{130}Te 质量	~ 1.3 t	~ 3.9 t	~ 100 t
液闪质量	780 t	780 t	20 kt
$T_{1/2}^{0\nu}$ 目标	$\sim 2 \times 10^{26}$ yr, 90% C.L.	$\sim 7 \times 10^{26}$ yr, 90% C.L. 到达质量反序区域底部	$\sim 1.34 \times 10^{28}$ yr
对应 $m_{\beta\beta}$ 灵敏度	约 29~137 meV	约 17~73 meV	约 4~17 meV
计划采数时间	3年	~5年	-
能量分辨率要求 σ/E	~4%	-	~1.9%

碲在元素周期表中的位置

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	S Block												P Block					
1	H Hydrogen 1 1.0078																	He Helium 2 4.0026
2	Li Lithium 3 6.9410	Be Beryllium 4 9.0122																
3	Na Sodium 11 22.990	Mg Magnesium 12 24.305											B Boron 5 10.811	C Carbon 6 12.011	N Nitrogen 7 14.007	O Oxygen 8 15.999	F Fluorine 9 18.998	Ne Neon 10 20.180
4	K Potassium 19 39.098	Ca Calcium 20 40.078											Al Aluminum 13 26.982	Si Silicon 14 28.086	P Phosphorus 15 30.974	S Sulfur 16 32.065	Cl Chlorine 17 35.453	Ar Argon 18 39.948
5	Rb Rubidium 37 85.468	Sr Strontium 38 87.620	Y Yttrium 39 88.906	Zr Zirconium 40 91.224	Nb Niobium 41 92.906	Mo Molybdenum 42 95.950	Tc Technetium 43 98	Ru Ruthenium 44 101.07	Rh Rhodium 45 102.91	Pd Palladium 46 106.42	Ag Silver 47 107.87	Cd Cadmium 48 112.41	In Indium 49 114.82	Sn Tin 50 118.71	Sb Antimony 51 121.76	Te Tellurium 52 127.60	I Iodine 53 126.90	Xe Xenon 54 131.29
6	Cs Caesium 55 132.91	Ba Barium 56 137.33	57-71	Hf Hafnium 72 178.49	Ta Tantalum 73 180.95	W Tungsten 74 183.84	Re Rhenium 75 186.21	Os Osmium 76 190.23	Ir Iridium 77 192.22	Pt Platinum 78 195.08	Au Gold 79 196.97	Hg Mercury 80 200.59	Tl Thallium 81 204.38	Pb Lead 82 207.20	Bi Bismuth 83 208.98	Po Polonium 84 209	At Astatine 85 210	Rn Radon 86 222
7	Fr Francium 87 223	Ra Radium 88 226	89-103	Rf Rutherfordium 104 261	Db Dubnium 105 262	Sg Seaborgium 106 264	Bh Bohrium 107 264	Hs Hassium 108 269	Mt Meitnerium 109 278	Ds Darmstadtium 110 281	Rg Roentgenium 111 282	Cn Copernicium 112 285	Nh Nihonium 113 286	Fl Flerovium 114 289	Mc Moscovium 115 289	Lv Livermorium 116 293	Ts Tennessine 117 294	Og Oganesson 118 294

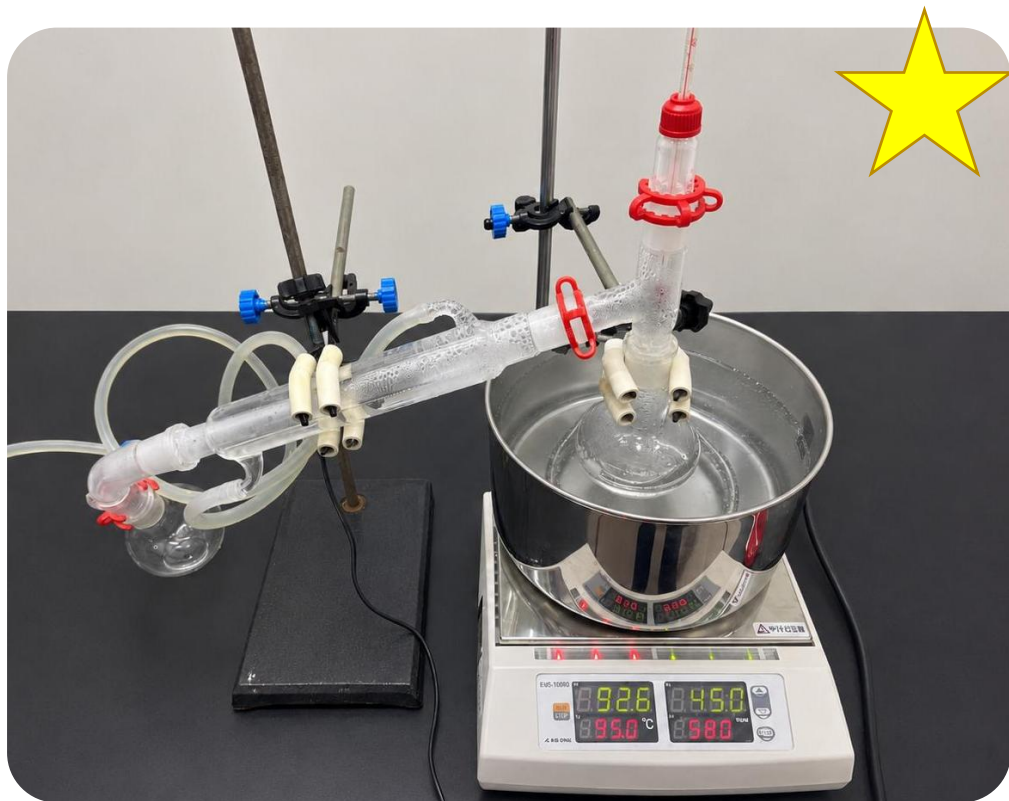
Atomic Number — 1 — Atomic Mass
Element Symbol — **H** —
Element Name — Hydrogen



F Block	Lanthanide Series	6	57 138.91 La Hydrogen	58 140.12 Ce Cerium	59 140.91 Pr Praseodymium	60 144.24 Nd Neodymium	61 145 Pm Promethium	62 150.36 Sm Samarium	63 151.96 Eu Europium	64 157.25 Gd Gadolinium	65 158.93 Tb Terbium	66 162.5 Dy Dysprosium	67 164.93 Ho Holmium	68 167.26 Er Erbium	69 168.93 Tm Thulium	70 173.04 Yb Ytterbium	71 174.97 Lu Lutetium
	Actinide Series	7	89 227 Ac Actinium	90 232.04 Th Thorium	91 231.04 Pa Protactinium	92 238.03 U Uranium	93 237.05 Np Neptunium	94 244 Pu Plutonium	95 243 Am Americium	96 247 Cm Curium	97 247 Bk Berkelium	98 251 Cf Californium	99 252 Es Einsteinium	100 257 Fm Fermium	101 258 Md Mendelevium	102 259 No Nobelium	103 262 Lr Lawrencium

- Transition metals
- Alkaline-earth metals
- Nonmetals
- Post-transition metals
- Actinoid
- Noble gas
- Alkali metals
- Metalloids
- Rare earth elements (21, 39, 57-71) and lanthanoid elements (57-71 only)

掺碲液闪的合成



① 化学合成碲的有机化合物



② 溶解碲的有机化合物到液闪溶剂中
通常为**线性烷基苯** (LAB)

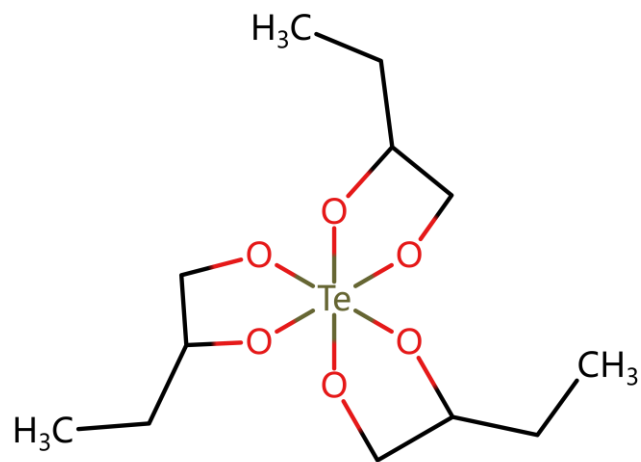
掺碲液闪的合成

文献	碲源	有机配体	反应条件	增溶剂	最佳产物	1wt%Te光产额
Auty et al. 2023	碲酸（水溶液）	1,2-丁二醇（BD）	水-醇均相，加热/室温	N,N-二甲基十二胺（DDA）	$\text{Te(OH)}_2\text{BD}_2$	60%
Ding et al. 2023 Ding et al. 2026	碲酸（固体）	1,2-己二醇（HD）	乙腈/甲醇均相	N,N-二甲基十二胺（DDA）	Te(OH)HD_3 $\text{Te}_2\text{O(OH)}_2\text{HD}_4$	40%
Suslov et al. 2022	四氯化碲	苯基（来自四苯基锡） + 2-乙基己酸	多步合成	本身易溶	$\text{TePh}_2(\text{RCOO})_2$	30%
Suslov et al. 2025	二氧化碲	1,2-丁二醇（BD）	m-苯磺酸催化	辛胺（OA）	TeBD_2	48%

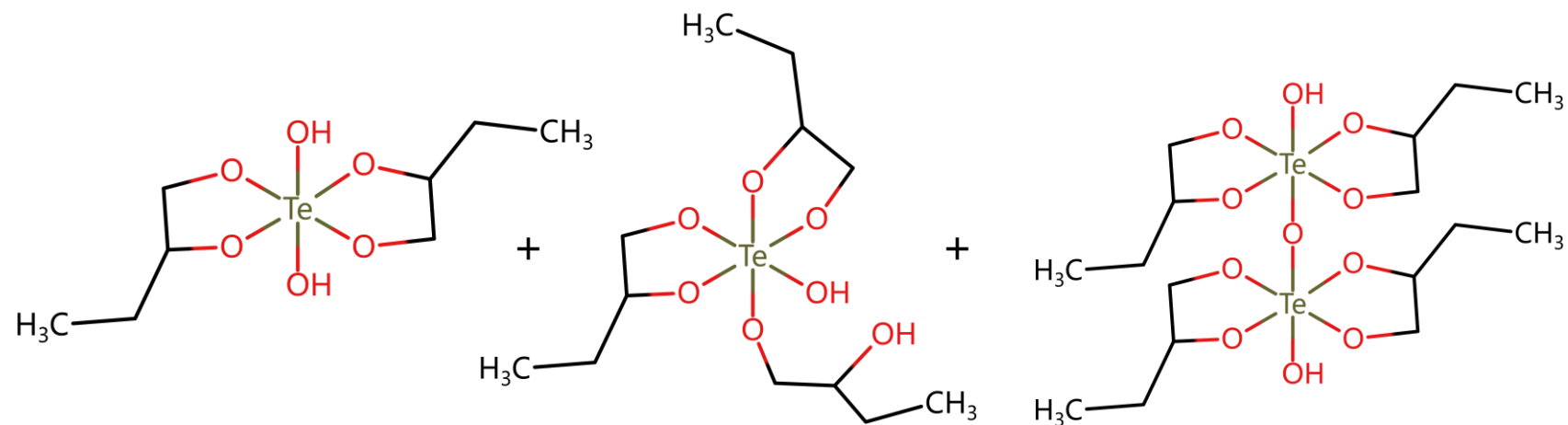
*相对未掺Te液闪

Auty DJ, Bartlett D, Biller SD, Chauhan D, Chen M, et al. 2023. NIM A. 1051:168204
Ding Y-Y, Liu M-C, Wen L-J, Li Y, Li G, Zhang Z. 2023. NIM A. 1049:168111
Ding Y-Y, Liu M-C, Li G-S, Wen L-J, Liu F, et al. 2026. NIM A. 1088:171531
Suslov IA, Nemchenok IB, Shitov YA, Kazartsev SV, Belov VV, Bystryakov AD. 2022. NIM A. 1040:167131
Suslov I, Nemchenok I, Bystryakov A. 2025. J. Inst. 20(04):P04032

掺碲液闪的合成



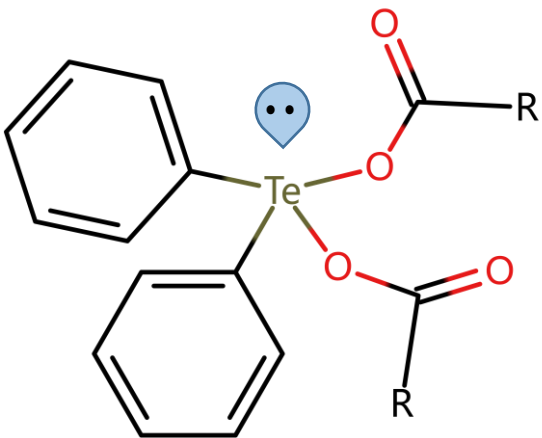
理想的 TeBD_3



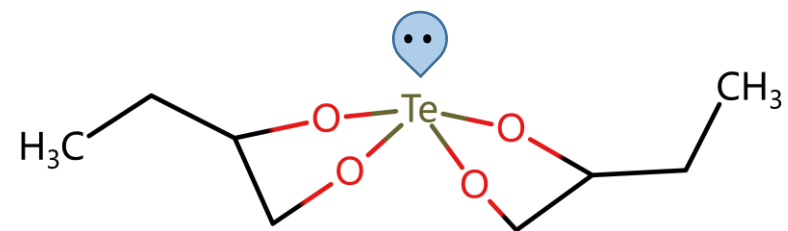
实际的合成产物

Auty2023

掺碲液闪的合成

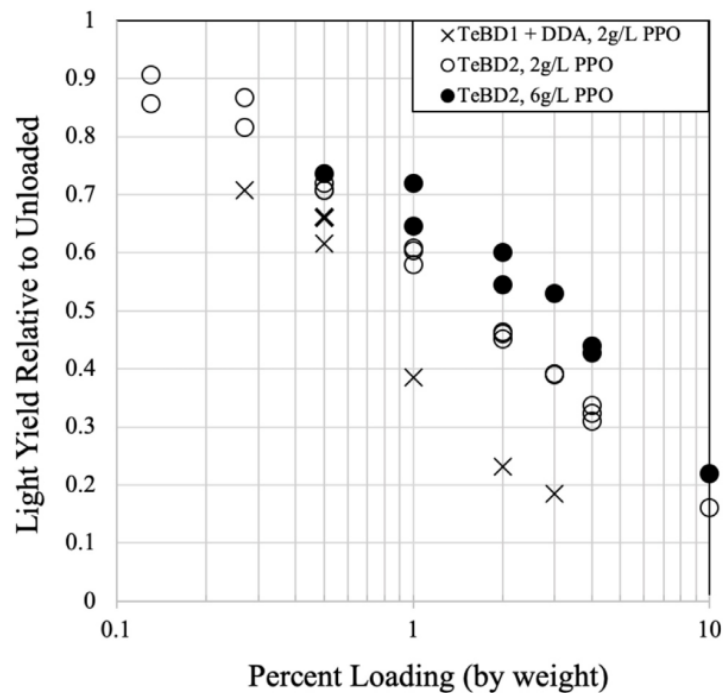


Suslov2023

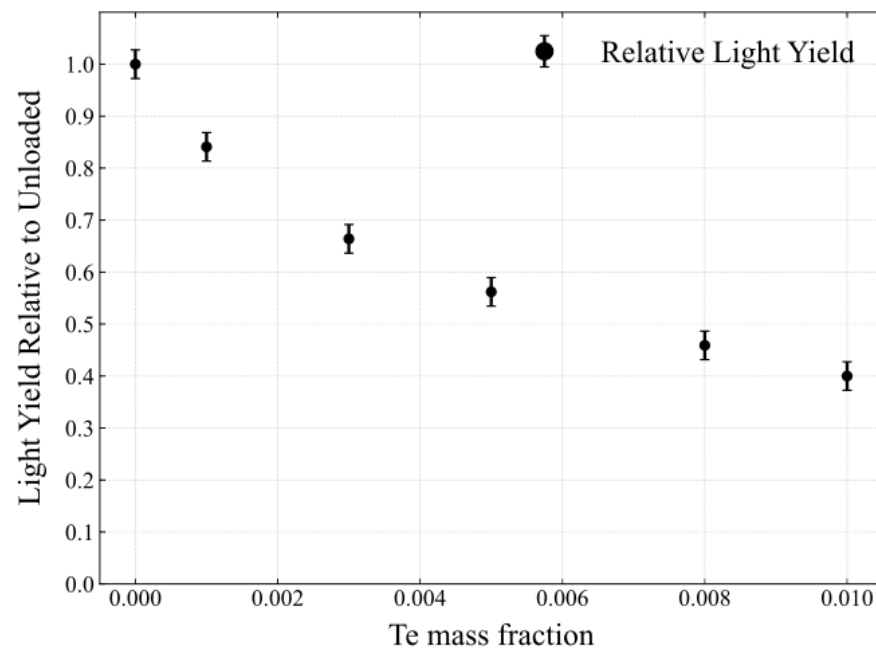


Suslov2025

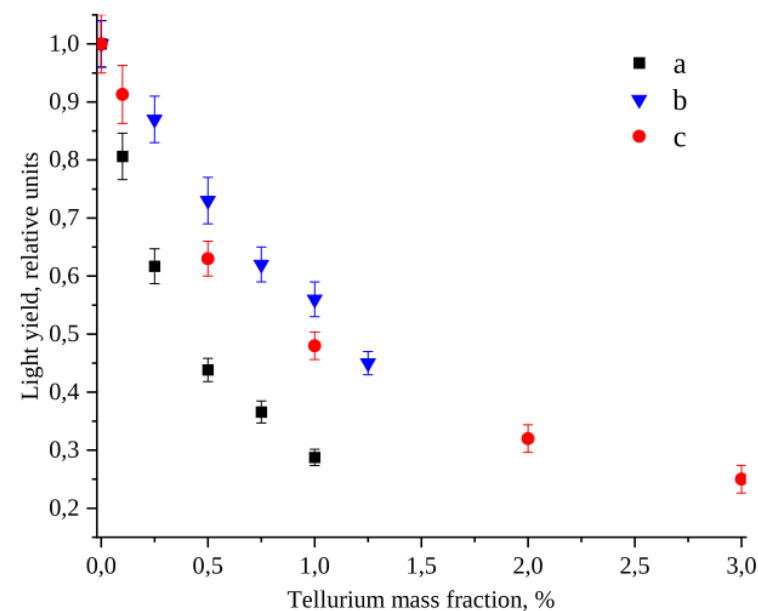
掺碲液闪的光产额



Auty2023



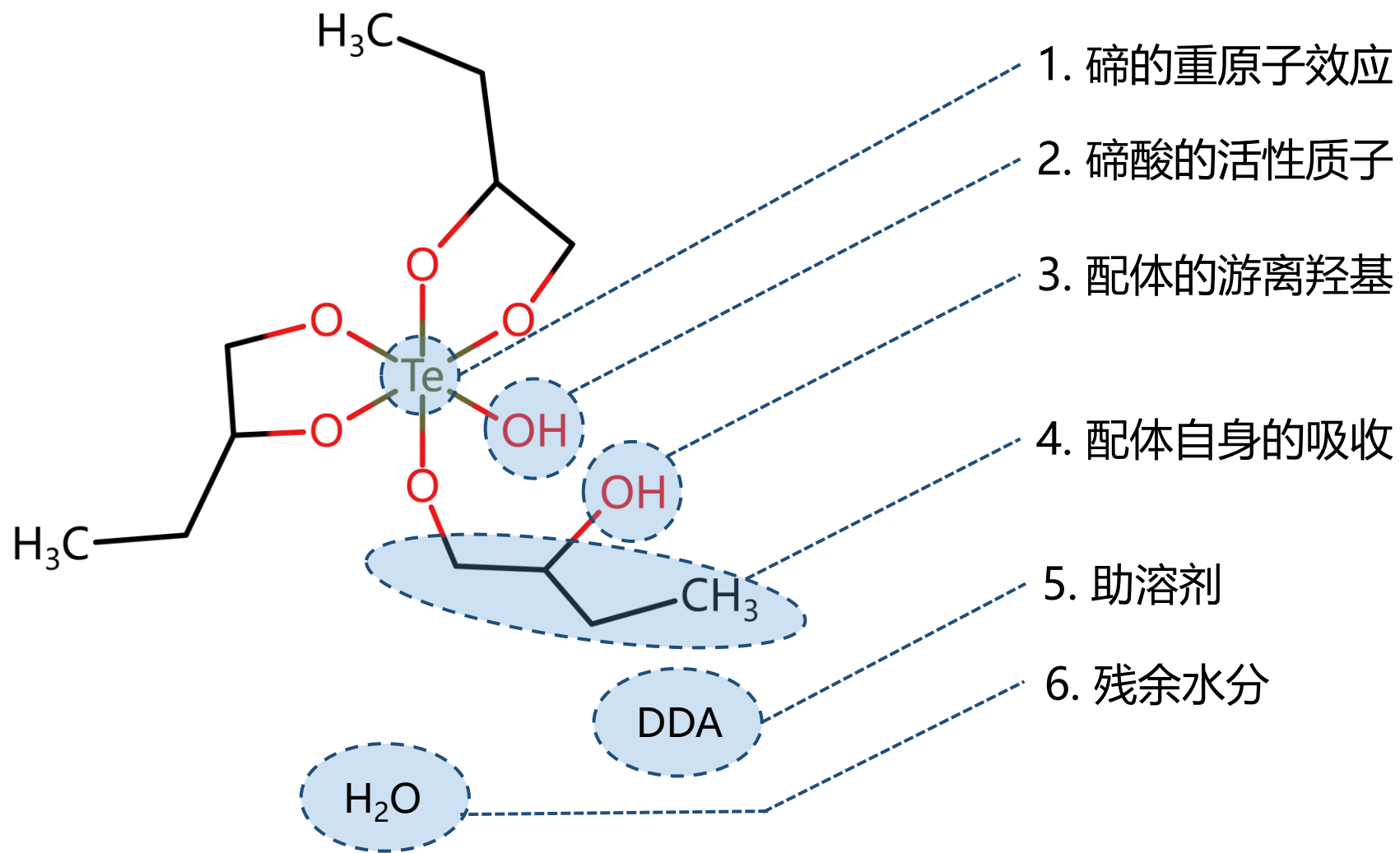
Ding2026



Suslov2025

掺1 wt% Te时光产额降低**40%以上**

掺碲液闪淬灭的可能机制



掺碲液闪淬灭的可能机制

讨论的思路和意义:

- 通过文献中类似体系的淬灭情况类比放缩, 粗略估计含1 wt%Te的LAB液闪中各种机制造成淬灭的比例
- 对各种机制的作用程度形成初步的印象, 为严格的实验研究提供方向

1. 重原子效应

重原子效应：重原子的原子核可以诱导分子激发态通过**系间窜跃**耗散激发能，从而导致闪烁光淬灭。

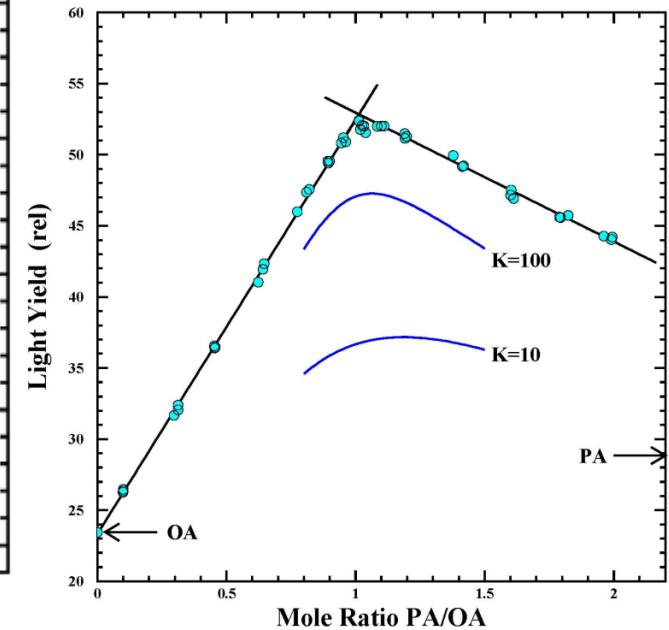
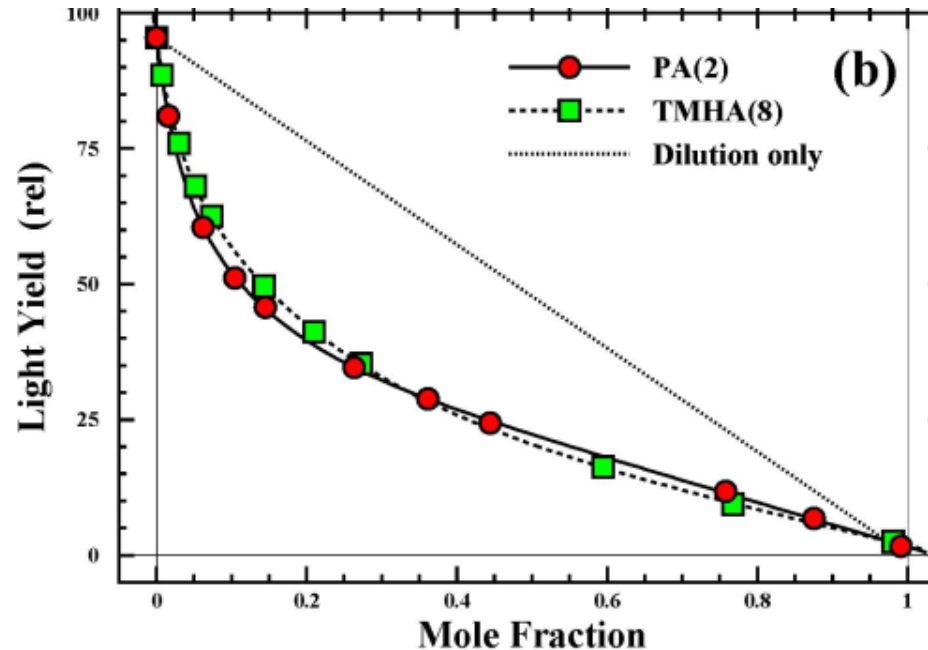
KamLAND-Zen 掺Xe液闪：

- 3.13 wt% Xe溶于十二烷-偏三甲苯液闪，PPO含量从1.36g/L调至2.7g/L
- 光产额降低10%；若排除PPO的补偿作用（Design Report 1998 Fig.25），估计光产额降低~23%
- 对应1 wt% Xe淬灭8.7%
- Te的原子序数略小于Xe，粗略推测掺1%时因重原子效应造成的淬灭应 $\leq 8.7\%$ 量级

Te的重原子效应可能是光产额淬灭的显著因素，但不足以解释全部淬灭

2. Lewis酸性

- Lewis酸性造成的淬灭与酸的类型关系不大
- LAB+1wt% Te对应的TeBD摩尔分数是0.02，估计Lewis酸性造成的淬灭~13%
- 若与胺类成盐，淬灭~6%



残余碲酸羟基的酸性可能是光产额淬灭的显著因素

3. 配体游离羟基

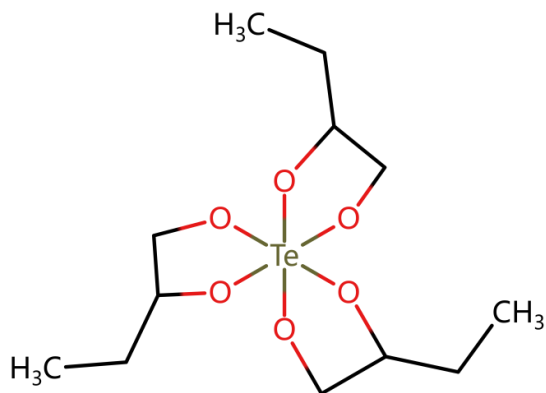
- 根据Ding2023实验数据, 可估计0.067M的游离羟基 (1wt% Te, 每个TeBD带一个游离醇羟基) 造成~6%的光产额淬灭

Relative light yields of LS with DDA and 1,2-hexanediols.

Samples	R. L. Y.
LS	100%
LS with 0.2%DDA and 1.4% 1,2-hexanediol 0.20 M OH	83% $\pm$ 4%
LS with 0.2%DDA and 2.8% 1,2-hexanediol 0.41 M OH	77% $\pm$ 4%

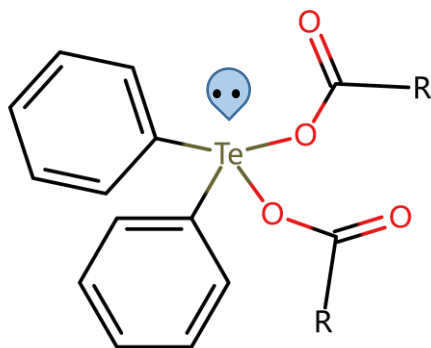
配体游离羟基可能是引起闪烁光淬灭的显著因素之一

4. 配体自身吸收



- 烷氧基: $\sigma \rightarrow \sigma^*$ 或 $n \rightarrow \sigma^*$ 跃迁, 吸收在200nm以下

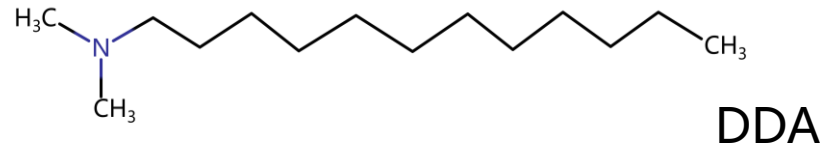
对于碲酸二醇酯, 配体自身吸收不是淬灭的主要因素



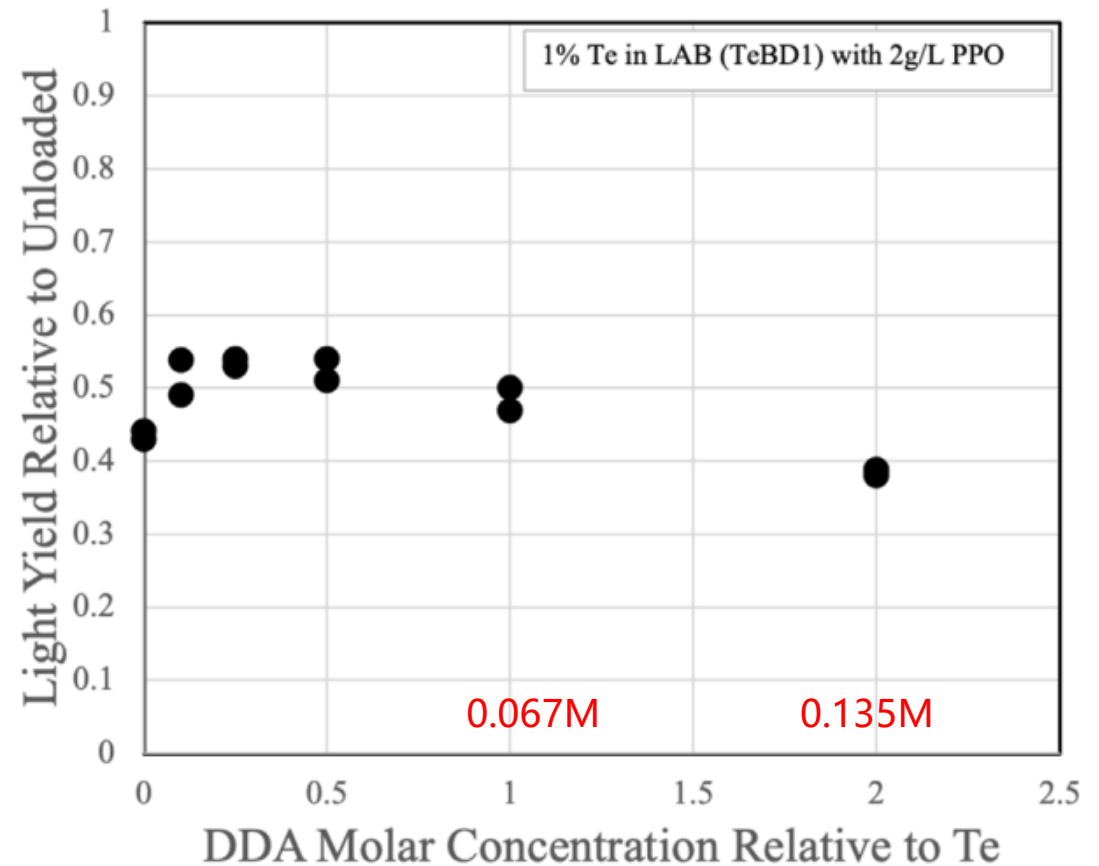
- 苯基: $\pi \rightarrow \pi^*$ 吸收, 强吸收, 在约180–210nm
- 酰氧基: $n \rightarrow \pi^*$ 吸收, 通常在200–230nm附近

对于苯基碲、酰氧基碲, 配体自身吸收可能相对严重

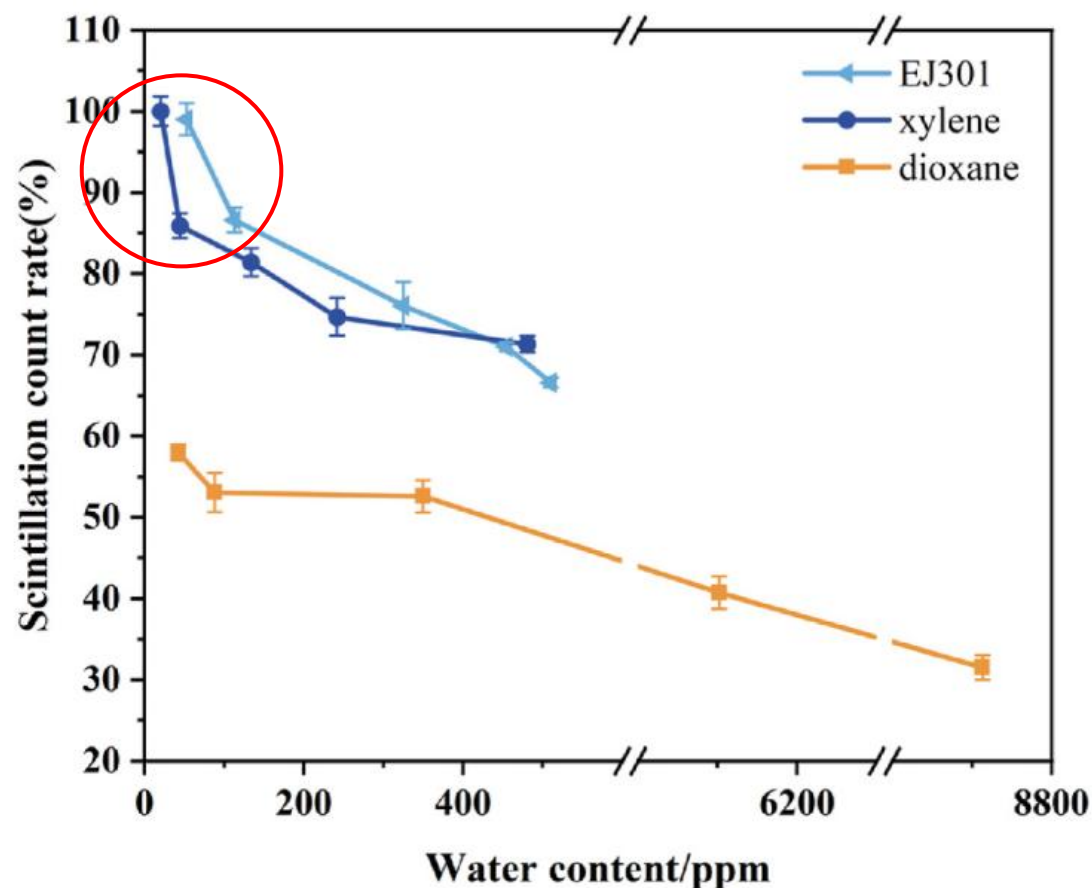
5. 助溶剂



- 少量的DDA可中和碲酸，提高光产额
- DDA每过量0.067M，造成光产额下降10%



6. 残余水分



100ppm=0.01%时, 降低15%!
之后每增加0.01%, 降低约6%

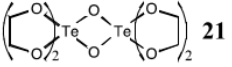
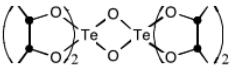
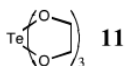
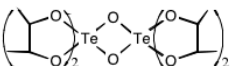
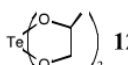
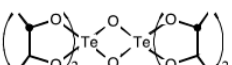
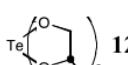
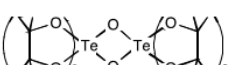
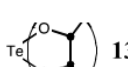
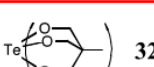
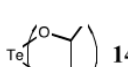
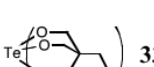
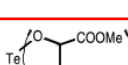
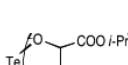
可溶于LAB的TeBD, 含水<~1700ppm (Tian2017)
制成1wt% Te液闪, 含水<0.004%, 估计造成淬灭<~6%

残余水分可能是淬灭的主要因素之一

合成和提纯方法

Bausch S. 2001博士论文给出了碲酸二元醇酯完整的合成、提纯方法：

- **完全缩合的碲酸二元醇酯为晶体**
- 完全缩合的碲酸二元醇酯有一定耐水性
- 需要100°C以上、16~24h加热以形成完全缩合产物
- 可以通过**减压升华法**将单核产物与多核产物分离，并可进一步通过重结晶提纯

Verbindung	Smp. /Zers. in °C	Verbindung	Smp. /Zers. in °C
$\text{Te}(\text{OMe})_6$ 1	75 ^{#1}	 21	> 200 Zers. [†] ohne Schmelzen
$\text{Te}(\text{OEt})_6$ 2	24 -27	 23	192 Zers. [†]
 11	203 ^{#2} Zers.	 24	205 Zers. [†]
 12	68 [†]	 24*	194 Zers. [†]
 12*	90 - 106 [†]	 25	210 Zers. [†]
 13	75 [†]	 32	> 350
 14	86 [†]	 33	> 350
 16	170 Zers. [†]	$\text{Te}_2\text{O}_{14}\text{C}_8\text{H}_4 \cdot 4 (\text{CH}_3)_2\text{SO}$ 40	> 250 Zers. ohne Schmelzen
 18	57 - 70 [†]		

室温下都是固体！

^{#1} diese Arbeit; Pellini ^[3]: 75 °C, Sebastian ^[28]: 86 °C, Agranat et al. ^[50]: 85 - 86 °C

^{#2} diese Arbeit; Fraser ^[19]: 199 °C, Sebastian ^[20]: 200 °C; Racemat

[†] Diastereomengemisch

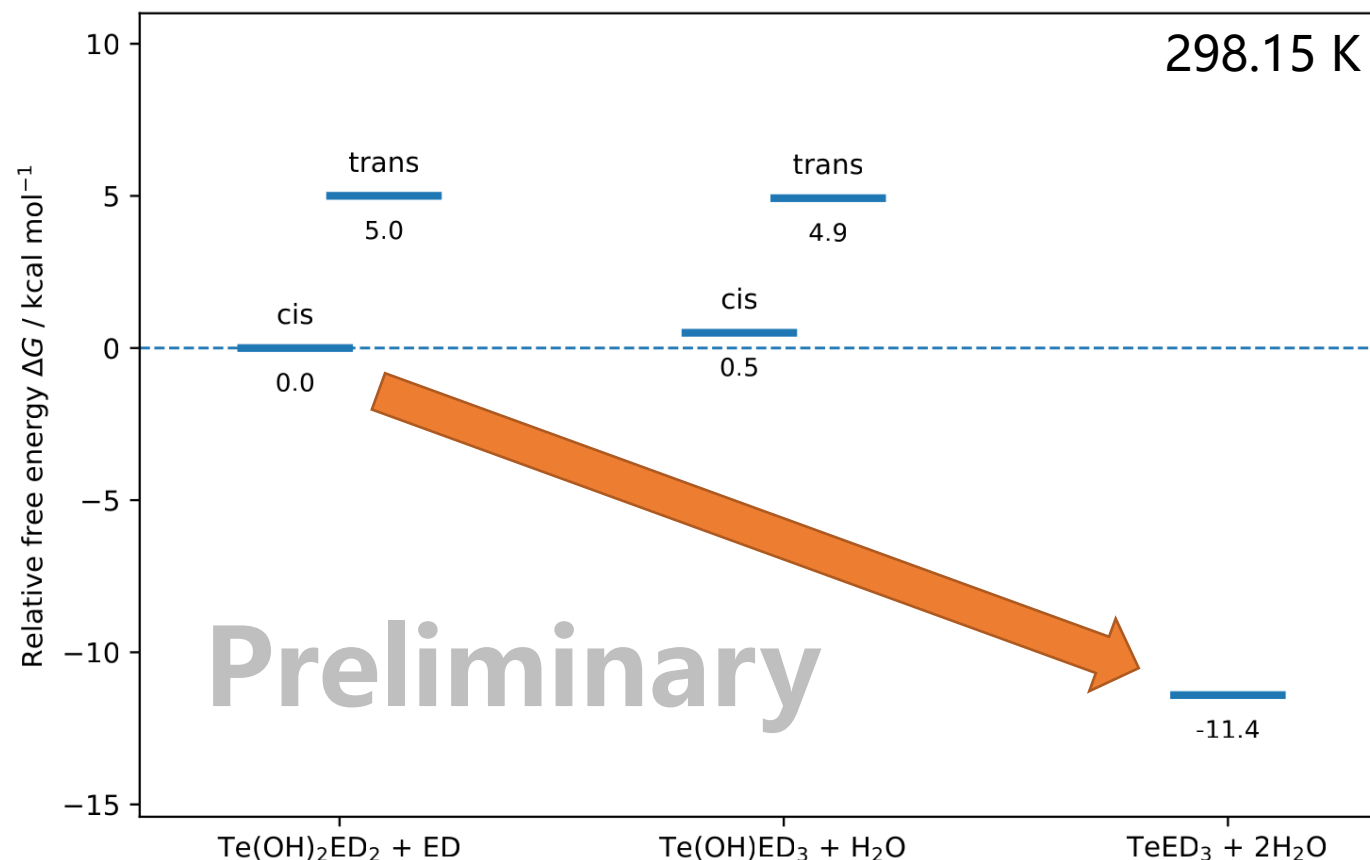
碲酸二元醇酯合成的热力学

考虑碲酸乙二醇 (ED) 酯,

通过计算化学方法估计热力学稳定性:

- CREST构象搜索, 取各物种最稳定构象
- r2SCAN-3c级别计算构象自由能

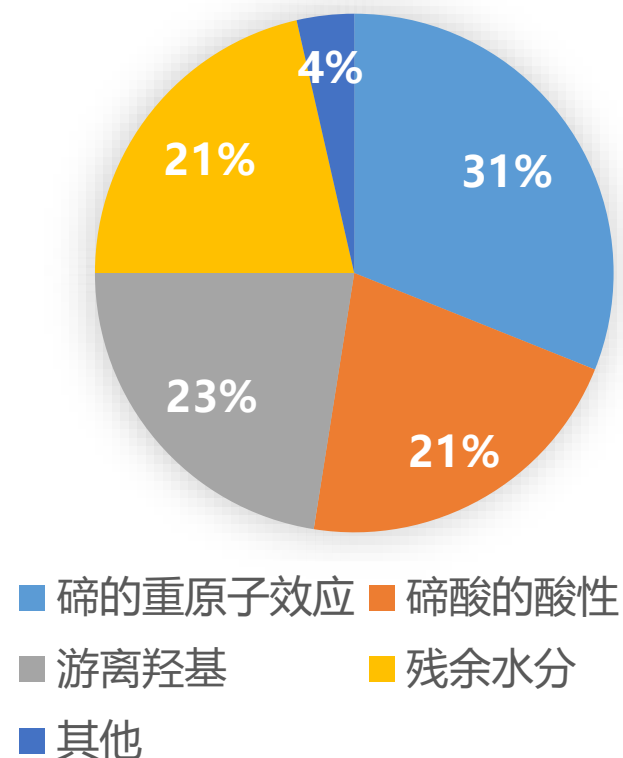
- $\text{Te}(\text{OH})_2\text{ED}_2$ 形成 $\text{Te}(\text{OH})\text{ED}_3$ 驱动力不明显, 但最终形成 TeED_3 趋势很强
- 需要足够能量和时间翻越中间步骤
- 提高温度有利于形成 TeED_3



总结

- 掺碲液闪中，造成淬灭的最重要因素可能是碲的重原子效应。
- 此外，碲酸酸性、配体的游离羟基、残余的水分是淬灭重要的因素。
- **重原子效应**：无法完全消除，只能通过减少碰撞机会来减轻淬灭。
- **碲酸酸性和游离羟基**：可以通过合成、提纯完全配位的 $\text{Te}(\text{diol})_3$ 来消除。
- **残余水分**：可以通过无水合成、强力干燥来消除。

估计的淬灭比例%



欢迎讨论!



JINPING
NEUTRINO
EXPERIMENT



CJPL



清华大学
Tsinghua University