

基于高斯-赫米特源项展开法的X射线自由电子激光研究

顾小卫¹, 蒙林², 黄炯¹

(1. 浙江理工大学信息学院 杭州 310018; 2. 电子科技大学物理电子学院 成都 610054)

【摘要】利用光场的高斯-赫米特源项展开法, 推导了粒子运动一维方程加三维修正和光场幅度、光束半径、瑞利参数的非线性方程组, 编制稳态Matlab FEL code程序, 初始粒子加载与国际通用软件Genesis进行对比, 吻合很好。新程序对于X射线FEL理论研究的深化, 实验装置的设计和改进具有重要意义。

关键词 高斯-赫米特源项展开; Genesis; 光场参数; Matlab FEL code; 自辐射自放大自由电子激光
中图分类号 TP393 文献标志码 A doi:10.3969/j.issn.1001-0548.2014.04.011

New X-Ray FEL Simulation Program Based on Gauss-Hermite Source Expansion

GU Xiao-wei¹, MENG Lin², and HUANG Jiong¹

(1. School of Information Science and Technology, Zhejiang Sci-Tech University Hangzhou 310018;

2. School of Physical Electronics, University of Electronic Science and Technology of China Chengdu 610054)

Abstract Using light field Gaussian-Hermite source term expansion method to derive the nonlinear equations of one-dimensional FEL equation plus three-dimensional correction for particle and amplitude, the beam radius, Rayleigh parameters for light field, the steady-state Matlab code has been developed. The initial particle loading is consistent with each other for self-amplified spontaneous emission (SASE) single pass using new code and Genesis. The presented code is valuable for improving the X-ray FEL design.

Key words gaussian-hermite source term expansion; Genesis; light field parameters; Matlab FEL code ; self-amplified spontaneous emission

第四代X-ray自由电子激光装置耗资巨大, 要求从理论上对FEL做深入的探讨^[1-9], 进行实验研究。因此进行详细的数值模拟就显得尤为重要, 本文采用对光场进行Gauss-Hermite^[10]展开的数理模型对X-ray自由电子激光进行研究。

1 高斯-赫米特源项展开法

假定电子束在传输过程中没有横向聚束力。得到简化粒子运动方程^[11]如下:

$$\frac{d}{dz}\theta_j = 2k_u\eta_j - \frac{k}{2}p_j^2 \quad (1)$$

$$\frac{d}{dz}\eta_j = \frac{eK[JJ]}{2\gamma^2 m_e c^2} (\tilde{E}e^{i\theta_j} + \tilde{E}^*e^{-i\theta_j}) \quad (2)$$

$$\frac{d}{dz}x_j = p_j \quad (3)$$

$$\frac{d}{dz}p_j = 0 \quad (4)$$

式中, θ_j 为第 j 个粒子相位; η_j 为无量纲能散; x_j 为横向位置; p_j 为动量; k_u 和 k 分别是摇摆器和辐射光场的波数; K 为 FEL 的摇摆器参数, $K = eB/k_u m_e c$, B 为摇摆器磁场的最大值; $[JJ]$ 为标准的贝塞尔函数因子。

引入单粒子相空间分布函数 $f(\theta, x, \eta, p, z)$, 通过守恒方程 $df/dz = 0$ 和式(1)~式(4), 可得到如下无碰撞波尔兹曼方程:

$$\frac{df}{dz} = \left[\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial x}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial \eta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \eta} \right] f = \left[\frac{\partial}{\partial z} + \left(2k_u\eta_j - \frac{k}{2}p_j^2 \right) \frac{\partial}{\partial \theta} + p_j \frac{\partial}{\partial x} + \frac{eK[JJ]}{2\gamma^2 m_e c^2} \times (\tilde{E}e^{i\theta_j} + \tilde{E}^*e^{-i\theta_j}) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] f = 0 \quad (5)$$

式(5)在横向相空间 (x, p) 的未扰动方程解为:

收稿日期: 2013-09-28; 修回日期: 2014-03-11

基金项目: 国家自然科学基金(11347125); 浙江省科技厅钱江人才计划(2013R10064); 浙江省自然科学基金(LY14E070009); 中国博士后科学基金(2014M551735)

作者简介: 顾小卫(1980-), 男, 博士, 主要从事自由电子激光器、高功率微波、低温等离子体物理等方面的研究。

$$f(\theta, \mathbf{x}, \eta, \mathbf{p}, z) = \frac{\tilde{f}(\theta, \eta, z)}{4\pi^2 \sigma_x \sigma_{p,x} \sigma_y \sigma_{p,y}} \times e^{-\left(\frac{[x, y - (z - z_{0,x,y})p_{x,y}]^2 + p_{x,y}^2}{2\sigma_{x,y}^2} + \frac{p_{x,y}^2}{2\sigma_{p,x,y}^2}\right)} \quad (6)$$

将式(6)代入无碰撞波尔兹曼方程式(5), 可得:

$$\frac{\tilde{f}(\theta, \eta, z)}{4\pi^2 \sigma_x \sigma_{p,x} \sigma_y \sigma_{p,y}} \times \left[\frac{\partial}{\partial z} + \left(2k_u \eta_j - \frac{k}{2} p_j^2\right) \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{p} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{eK[JJ]}{2\gamma^2 m_e c^2} \times (\tilde{E} e^{i\theta_j} + \tilde{E}^* e^{-i\theta_j}) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] = 0 \quad (7)$$

为了消除横向自由度, 将式(7)对 (\mathbf{x}, \mathbf{p}) 作积分, 先对前两项简单积分, 可得:

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} + \left(2k_u \eta_j - \frac{k}{2} (\sigma_{p,x}^2 + \sigma_{p,y}^2)\right) \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \tilde{f}(\theta, \eta, z) \quad (8)$$

而对于第三项积分较复杂, 只对Gauss-hermite最低价模式进行分析可得:

$$\tilde{E} = \frac{\boldsymbol{\varepsilon}(z, \theta)}{\sqrt{\pi} \sqrt{\omega_x \omega_y}} e^{-\frac{1-i\alpha_x(z)}{\omega_x^2} x^2} e^{-\frac{1-i\alpha_y(z)}{\omega_y^2} y^2} e^{-\frac{i}{2}(\phi_x(z) + \phi_y(z))} \quad (9)$$

将式(9)代入式(7)中的第三项, 并且对横向 $(\mathbf{x} = (x, y), \mathbf{p} = (p_x, p_y))$ 作积分, 忽略辐射光场的复数项:

$$\int d\mathbf{x} d\mathbf{p} \frac{eK[JJ]}{2\gamma^2 m_e c^2} (\tilde{E} e^{i\theta_j} + \tilde{E}^* e^{-i\theta_j}) \frac{\partial}{\partial \eta} \tilde{f}(\theta, \eta, z) = \frac{1}{4\pi^2 \sigma_x \sigma_{p,x} \sigma_y \sigma_{p,y}} \frac{eK[JJ]}{2\gamma^2 m_e c^2} \frac{\boldsymbol{\varepsilon}(z, \theta)}{\sqrt{\pi} \sqrt{\omega_x \omega_y}} e^{-\frac{i}{2}(\phi_x(z) + \phi_y(z))} \times \int d\mathbf{x} d\mathbf{p} \times e^{-\left(\frac{[x, y - (z - z_{0,x,y})p_{x,y}]^2 + 1-i\alpha_{x,y}(z)}{\omega_{x,y}^2} (x, y)^2 + \frac{p_{x,y}^2}{2\sigma_{p,x,y}^2}\right)} \times \frac{\partial}{\partial \eta} \tilde{f}(\theta, \eta, z) \quad (10)$$

先对横向分量进行积分, 令 $\beta_{x,y} = \sigma_{x,y} / \sigma_{p_x, p_y}$, 并利用积分恒等式:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (11)$$

第三项最终可得如下形式:

$$\frac{eK[JJ]}{2\gamma^2 m_e c^2} \left[\sqrt{\omega_x \omega_y} \boldsymbol{\varepsilon}(\theta, z) e^{-\frac{i}{2}(\phi_x(z) + \phi_y(z))} \right] \times \left(\sqrt{\pi} \left\{ 2\sigma_{x,y}^2 (1 - i\alpha_{x,y}(z)) \left(1 + \frac{(z - z_{0,x,y})^2}{\beta_{x,y}^2} + \omega_{x,y}(z)^2 \right) \right\}^{1/2} + c.c. \right) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \eta} \quad (12)$$

定义耦合因子为:

$$\frac{1}{\mu(z)} = \left[\sqrt{\omega_x} \sqrt{\omega_y} \boldsymbol{\varepsilon}(\theta, z) e^{-\frac{i}{2}(\phi_x(z) + \phi_y(z))} \right] \times \left(\sqrt{\pi} \left\{ 2\sigma_{x,y}^2 (1 - i\alpha_{x,y}(z)) \left(1 + \frac{(z - z_{0,x,y})^2}{\beta_{x,y}^2} + \omega_{x,y}(z)^2 \right) \right\}^{1/2} \right) \quad (13)$$

最终得到无碰撞波尔兹曼方程为:

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} + \left(2k_u \eta_j - \frac{k}{2} \sigma_{p,x,y}^2\right) \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{eK[JJ]}{2\gamma^2 m_e c^2} \times \left[\frac{\boldsymbol{\varepsilon}(\theta, z)}{\mu(z)} e^{i\theta} + \frac{\boldsymbol{\varepsilon}^*(\theta, z)}{\mu(z)^*} e^{-i\theta} \right] \frac{\partial}{\partial \eta} \right] \tilde{f}(\theta, \eta, z) = 0 \quad (14)$$

从上可得简化的单粒子运动方程:

$$\frac{d}{dz} \theta_j = 2k_u \eta_j - \frac{k}{2} (\sigma_{p,x}^2 + \sigma_{p,y}^2) \quad (15)$$

$$\frac{d}{dz} \eta_j = \frac{eK[JJ]}{2\gamma^2 m_e c^2} \left[\frac{\boldsymbol{\varepsilon}(\theta, z)}{\mu(z)} e^{i\theta} + \frac{\boldsymbol{\varepsilon}^*(\theta, z)}{\mu(z)^*} e^{-i\theta} \right] \quad (16)$$

粒子通过麦克斯韦波动方程耦合到场方程中, 在旁轴假设条件下有:

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} + k_u \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\nabla_{\perp}^2}{2ik} \right] \tilde{E} = \frac{eK[JJ] N_e}{4\epsilon_0 \gamma} \frac{1}{2\pi} \times \int d\theta d\eta dp e^{-i\theta} f(\theta, \mathbf{x}, \eta, \mathbf{p}, z) \quad (17)$$

结合式(6)和式(9)再横向积分, 利用Hermite常微分方程的恒等式、递归式和Hermite函数的正交性, 经过复杂推导可得 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 场方程、 ω 、 α 光场模式参数方程为:

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial z} + i \right) \left(\frac{\alpha'_{x,y}}{2} - \frac{\omega'_{x,y}}{\omega_{x,y}} \alpha_{x,y} - \phi'_{x,y} + \frac{1 + \alpha_{x,y}^2}{k\omega_{x,y}^2} \right) \right] \times \boldsymbol{\varepsilon}(z, \theta) = C \langle e^{-i\theta_j} \rangle \quad (18)$$

$$\left[\frac{\omega'_{x,y}}{\omega_{x,y}} - \frac{2\alpha_{x,y}}{k\omega_{x,y}^2} + i \left(\frac{\alpha'_{x,y}}{2} - \frac{\omega'_{x,y}}{\omega_{x,y}} \alpha_{x,y} - \frac{1 - \alpha_{x,y}^2}{k\omega_{x,y}^2} \right) \right] \times \boldsymbol{\varepsilon}(z, \theta) = -\frac{1}{2} C \left\{ \frac{A}{\omega_{x,y}^2 / 2\sigma_{x,y}^2 + B} - 2 \right\} \langle e^{-i\theta_j} \rangle \quad (19)$$

其中

$$A = 8(1 + (z - z_{0,x,y})^2 / \beta_{x,y}^2) \sigma_{x,y}^2$$

$$B = (1 + (z - z_{0,x,y}) / \beta_{x,y})(1 + i\alpha_{x,y})$$

$$C = -eK[JJ] N_e(\theta) / 2\gamma \epsilon_0 \mu(z)^* \lambda$$

对式(19)进行分解, 可得光束半径 (ω_x, ω_y) 和瑞利参数 (α_x, α_y) 微分方程为:

$$\omega'_{x,y} = -\omega_{x,y} \frac{eK[JJ] N_\lambda}{4\epsilon_0\gamma \lambda} \operatorname{Re} \left[\frac{\langle e^{-i\theta_j} \rangle}{\mathcal{E}(z, \theta) \mu^g} \times \left(\frac{A}{\omega_{x,y}^2 + 2\sigma_{x,y}^2 B} - 2 \right) \right] + \frac{2\alpha_{x,y}}{k\omega_{x,y}^2} \quad (20)$$

$$\alpha'_{x,y} = -\frac{eK[JJ] N_\lambda}{2\epsilon_0\gamma \lambda} \operatorname{Im} \left[\frac{\langle e^{-i\theta_j} \rangle}{\mathcal{E}(z, \theta) \mu^g} \times \left(\frac{A}{\omega_{x,y}^2 + 2\sigma_{x,y}^2 B} - 2 \right) \right] + 2 \left(\frac{\omega'_{x,y} \alpha_{x,y}}{\omega_{x,y}} + \frac{1 - \alpha_{x,y}^2}{k\omega_{x,y}^2} \right) \quad (21)$$

最后得到辐射电场的微分方程为:

$$\mathcal{E}'(z, \theta) = -\frac{eK[JJ]}{2\gamma\epsilon_0} \frac{1}{\mu(z)^*} \frac{N_\lambda(\theta)}{\lambda} \langle e^{-i\theta_j} \rangle - \frac{i}{2} \left(\frac{\alpha'_{x,y}}{2} - \frac{\omega'_{x,y}}{\omega_{x,y}} \alpha_{x,y} - \frac{\alpha_{x,y}}{1 + \alpha_{x,y}^2} + \frac{1 + \alpha_{x,y}^2}{k\omega_{x,y}^2} \right) \quad (22)$$

2 编制数值模拟软件 Matlab FEL code

2.1 处理辐射光场方程

编制新模拟软件相对于目前通用软件TDA3D^[12]和Genesis1.3^[13]所采用的方法不同, 将光场进行 Gauss-Hermite 多项式展开, 利用 Matlab 内置的 ODE 解算器求解, 精度较高。

2.2 “quiet start” 加载宏粒子

电子束初始加载(quiet loading)的程序编写很重要(SASE是一种无输入信号的单程放大器, 主要依赖电子束中的噪声或是自发辐射, 因此光场放大过程及输出特性具有很强的随机性, 程序的初值问题很重要)。对于编制一个 FEL 程序, 首先加载初始宏粒子, 其数目远远小于实际一个波长内的电子数目 N_λ 。而 SASE FEL 模拟程序开始于小信号, 必须压制数值噪声, 否则就会模拟不出真实情况, 甚至出现伪信号, 原则上需要初始电子均匀加载。而通常采取随机数加载, 有:

$$|b_0|^2 = \frac{1}{n^2} \sum_j e^{-i\theta_j} \sum_k e^{i\theta_k} = 1/n \gg 1/N_\lambda$$

初始电子加载有一定群聚, 如 n 越小, 初始电子群聚越严重, 导致模拟过程离实际越远。为减少数值噪声的影响, 同时降低不同取样变量之间的关联, 采用 Hammersley's sequence^[12]产生随机数, 定义如下:

$$\{(j-1/2)/N, \phi_2(j), \phi_3(j), \phi_5(j), \dots, \phi_r(j), \dots\} \quad j=1, 2, \dots, N \quad (23)$$

式中, $\phi_r(j)$ 以 r 为基的反转自由基函数(radical inversion function), 即:

$$\phi_r(j) = a_0 r^{-1} + a_1 r^{-2} + \dots, j = a_0 + a_1 r^1 + \dots \quad (24)$$

这就产生一系列互不相干的数, 如 $r=3$, 得到 $[1/3, 2/3, 1/9, 1/3+1/9, \dots]$ 。

对 Hammersley sequence 加载和随机数宏粒子初始加载对比, 可从图 1 和图 2 中看出。图 2 具有明显的局部聚束, 而图 1 宏粒子分布相当均匀。对于 Hammersley 序列, 只要取不同的基、基之间没有倍数关系、也不能取基的大小与取样数目相近, 那么序列的相关性就忽略不计, 本程序选基为质数 2, 3, 5, 7, 9, 11, 13。

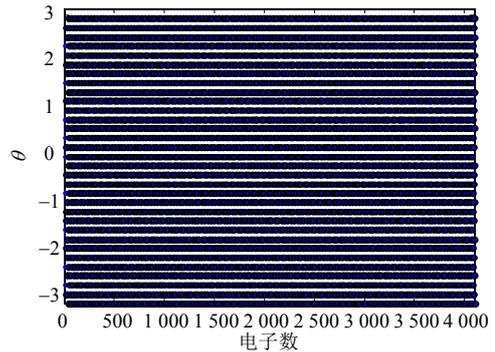


图1 Hammersley sequence 初始宏粒子加载

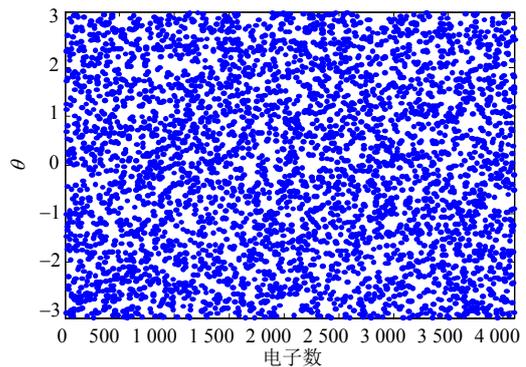


图2 随机数初始宏粒子加载

相位取样如果直接采用 Hammersley sequence 产生的均匀随机数加载到一个周期 $[-\pi, \pi]$ 上, 计算结果比随机加载改良情况高出 3 个数量级。采用“镜像”采样方式, 首先在 $[-\pi, -3/4\pi]$ 加载 1/4 的初始宏粒子, 然后依次移动相位 $1/4\pi, \pi, 3/4\pi$, 并加载 1/4 初始宏粒子。这种方法可以保证初始聚束因子约为 0; 而能量分布采用高斯分布。

2.3 验证 Matlab code 初始加载

粒子相空间三维初始加载与目前通用模拟程序 Genesis 对比。

图 3 所示为横向 x 方向动量与位置图, y 方向与之类似。图 4 所示为采用相同 Hammersley base 的粒子相空间图。对比发现, Matlab FEL code 程序初始三维加载可信。

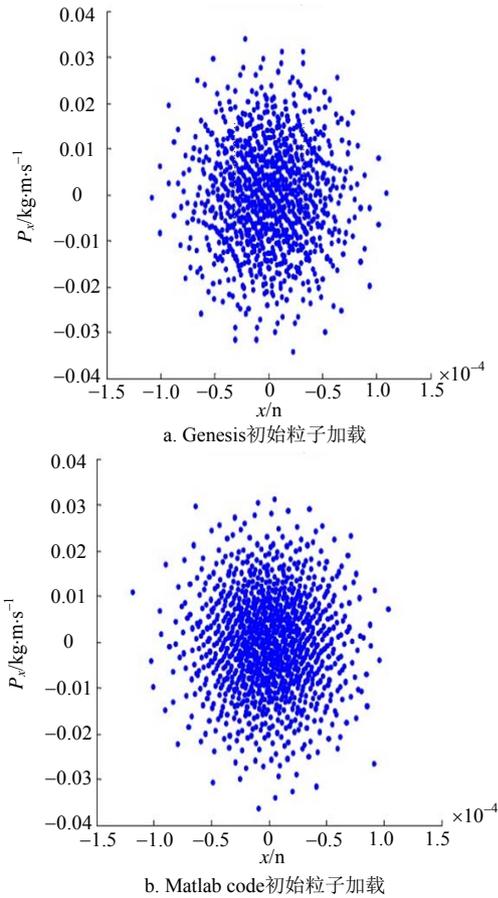


图3 Genesis和Matlab code初始三维粒子加载横向动量 P_x 和横向位置 x 对比图

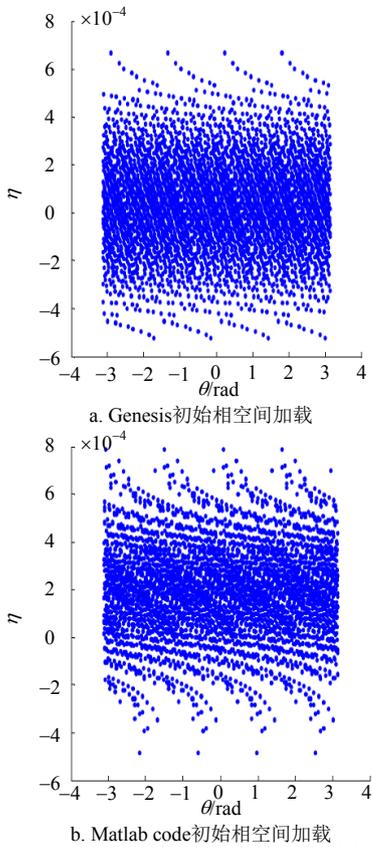


图4 Genesis和Matlab code初始三维粒子加载相空间对比图

3 验证Matlab code的正确性

为了确保程序能够正确模拟FEL，特对其进行SASE模拟，采用辐射光波波长为43 nm，参数如表1所示。

表1 43 nm SASE 的自由电子激光参数

参数		数值
电子束参数	归一化发射度/m.mrad	4×10^{-7}
	束能量/GeV	2.4
	能散/KeV	48
	电流/A	100
发射参数	束斑/m	3.5×10^{-5}
	波长/nm	43
	瑞利半径/m	33.5
	束腰位置	0
摇摆器参数	激发功率/W	1
	归一化参数	7.225
	周期/m	0.07
	长度/m	140

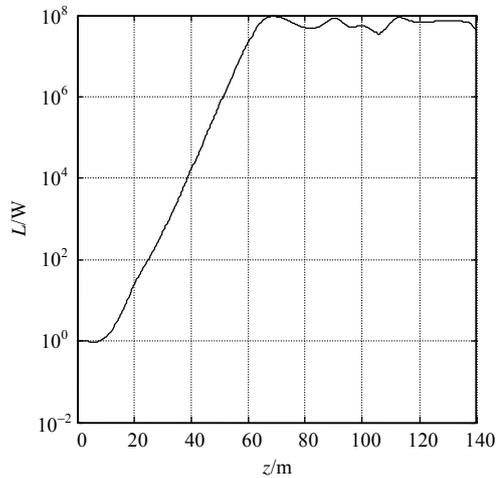


图5 光场辐射功率随摇摆器长度变化图

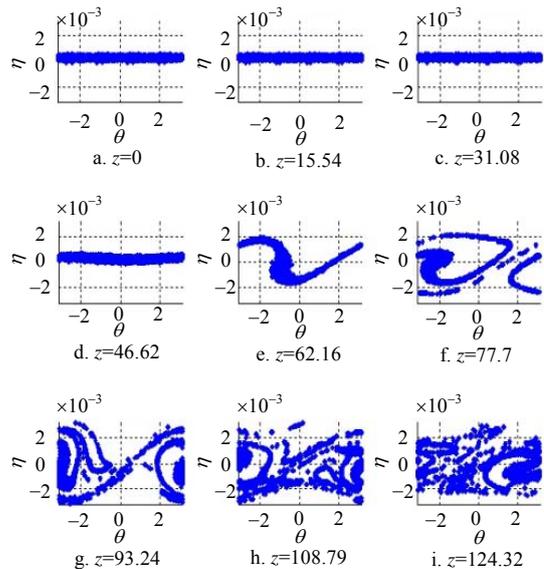


图6 粒子相空间随摇摆器长度的变化

从图5可看出，光场输出功率在摇摆器长度到

60 m以后达到饱和且最大, 得到合理的饱和长度, 说明程序可信。图6所示为粒子相空间随摇摆器长度的变化演示图。在摇摆器长度内等间距的选取9点观察点, 在46.62 m时, 电子束开始出现聚束效应; 到62.16 m时已经达到饱和; 过了该点后, 电子束开始出现过饱和现象。与图5中光场输出功率随摇摆器长度变化一致。

4 结束语

本文用高斯光场的赫米特源项展开法, 推导了FEL的粒子一维方程加三维修正和光场参数的非线性方程组, 采用Matlab内嵌ODE解算器来编制FEL稳态程序Matlab FEL code, 并用Genesis程序对比初始加载宏粒子及以43 nm自由电子激光参数为例进行模拟, 程序可靠。

参 考 文 献

- [1] RICHARD F, SCHNEIDE J R, TRINES D, et al. TESLA technical design report[R]. Hamburg: DESY, 2002.
- [2] ALEXANDER J, APPLETON S, ATKINSON P, et al. 4GLS conceptual design report[R]. Swindon: Daresbury Laboratory, 2006.
- [3] ROBINSON A L, PLUMMER B. Science and technology of future light sources[R]. Chicago, USA: ANL BNL LBNL SLAC, 2008.
- [4] ARTHUR J, ANFINRUD P, AUDEBERT P, et al. Linac coherent light source (LCLS) conceptual design report[R]. San Jose: SLAC, 2002.
- [5] YU Li-hua, BABZIEN M, BEN-ZVI I, et al. High-gain harmonic-generation free-electron laser[J]. Science, 2000, 289(1): 932-934.
- [6] STUPAKOV G. Using the beam-echo effect for generation of short-wavelength radiation[J]. Phys Rev Lett, 2009, 102: 074801.
- [7] XIANG Dao, STUPAKOV G. Echo-enabled harmonic generation free electron laser[J]. Phys Rev ST Accel Beams, 2009, 10: 030702.
- [8] KIM K J, SHVYD'KO Y, REICHE S. A proposal for an X-ray free-electron laser oscillator with an energy-recovery linac[J]. Phys Rev Lett, 2008, 100: 244802.
- [9] DATTOLI G, OTTAVIANI P L, PAGNUTTI S. High gain oscillators: Pluse propagation and saturation[J]. J Appl Phys, 2007, 101: 103109.
- [10] FREUND H P, BIEDRON S G, MILTON S V. Nonlinear harmonic generation in free electron lasers[J]. J Quantum Electron, 2000, 36(3): 275-281.
- [11] LINDBERG R R, KIM K J. Mode growth and competition in the x-ray free-electron laser oscillator start-up from noise[J]. Phys Rev ST Accel Beams, 2009, 12: 070702.
- [12] TRAN T M, WURTELE J S. TDA-A three-dimensional axisymmetric code for free-electron-laser simulation[J]. Computer Phys Communications, 1989, 54(2-3): 263-272.
- [13] REICHE S. Genesis 1.3: a fully 3D time-dependent FEL simulation code[J]. Nucl Instr Methods A 1999, 429(1-3): 243-248.

编辑 黄 莘