

光学学报

基于晶体布拉格反射镜的 X 射线谐振腔光学设计

张志远^{1,2}, 吴宸¹, 黄楠顺^{1,2}, 宋丽^{1,3}, 张增艳^{1,3}, 董晓浩^{1,3*}, 邓海啸^{1,3}, 王劫^{1,3}

¹中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800;

²中国科学院大学, 北京 100049;

³中国科学院上海高等研究院, 上海 201210

摘要 设计了一个以蓝宝石晶体作为布拉格反射镜构成的谐振腔系统, 控制 X 光脉冲辐射束的状态以实现其在一个开放腔中的稳定传输, 进而形成振荡。以两块平面晶体布拉格反射镜构成的开放稳定腔系统为模型, 通过计算其传输矩阵和分析辐射束横向稳定性条件, 得到了谐振腔中两块透镜的焦距和间距的关系。优化该谐振腔系统设计参数使之满足增益最大化条件, 即辐射束瑞利长度 Z_R 与电子束聚焦参数 Z_β 匹配。使用 X 射线追迹软件 SHADOW 进行光学追迹模拟。模拟结果显示, 辐射束在整个谐振腔系统中传输的单程损耗小于 20%, 在谐振腔中振荡一个周期后的状态与初始状态虽然有所差异但仍可接受。模拟结果表明了该谐振腔系统光学设计参数的可行性。

关键词 X 射线光学; 自由电子激光; 布拉格反射镜; X 射线自由电子激光振荡器; 布拉格衍射

中图分类号 O434

文献标志码 A

DOI: 10.3788/AOS202242.1134017

Optical Design of X-Ray Resonant Cavity Based on Crystal Bragg Mirrors

Zhang Zhiyuan^{1,2}, Wu Chen¹, Huang Nanshun^{1,2}, Song Li^{1,3}, Zhang Zengyan^{1,3},
Dong Xiaohao^{1,3*}, Deng Haixiao^{1,3}, Wang Jie^{1,3}

¹ Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;

² University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

³ Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201210, China

Abstract A resonant cavity system composed of a sapphire crystal as a Bragg mirror is designed to control the state of the X-ray pulse radiation beam to achieve stable propagation in an open cavity, and then form oscillation. Taking the open stable cavity system composed of two plane crystal Bragg mirrors as the model, the relationship between the focal length and the distance between the two lenses in the resonant cavity is obtained by calculating the transport matrix and analyzing the lateral stability condition of the radiation beam. The design parameters of the resonant cavity system are optimized to satisfy the gain maximization condition, i. e., the Rayleigh length Z_R of the radiation beam matches the focusing parameter Z_β of the electron beam. The X-ray tracing software SHADOW is used to simulate the optical tracing. The simulation results show that the single-pass loss of the radiation beam in the entire resonant cavity system is less than 20%. Although different from the initial state, the state of the radiation beam after oscillating for one period in the resonant cavity is acceptable. The simulation results show that the optical design parameters of the resonant cavity system are feasible.

Key words X-ray optics; free electron laser; Bragg mirrors; X-ray free electron laser oscillators; Bragg diffraction

收稿日期: 2022-02-09; 修回日期: 2022-03-18; 录用日期: 2022-04-18

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(11935020)、国家自然科学基金联合基金项目(U1832172)、上海市市级科技重大专项(2017SHZDZX02)、中国科学院“BR 计划”人才项目(2018)

通信作者: *dongxiaohao@zjlab.org.cn

1 引言

目前备受关注的基于谐振腔模式的自由电子激光类型包括: X 射线自由电子激光振荡器(XFEL)和 X 射线再生放大器自由电子激光(XRFEL),分别以高品质因数(Q)和高增益系数(G)作为谐振腔的基本特征^[1-2]。能够产生全相干 X 射线的自由电子激光振荡器是未来自由电子激光发展的一个重要方向。1971 年, Madey 等^[3]提出了自由电子激光的概念。1977 年, Deacon 等^[4]基于光学谐振腔实现了红外波段自由电子激光辐射束。1984 年, Colella 等^[5]提出了 X 射线自由电子激光振荡器,指出可用布拉格晶体实现 X 射线大角度、低损耗的反射。之后,自由电子激光振荡器的研究工作陷入了停滞,因为缺少产生高品质电子束的加速器而无法获得足够的单程增益,同时缺少在短波长波段有高反射率的谐振腔反射镜材料。2008 年, Kim 等^[1,6]论证了产生波长为 1×10^{-10} m 的 X 射线自由电子激光振荡器的可行性,理论预测了某些晶体具有高布拉格衍射效率,并通过实验证实了这些材料可作为反射镜材料。在各个国家的 X 射线自由电子激光设施建成后,有关 X 射线自由电子激光振荡器的研究被迅速开展。美国直线加速器相干光源(LCLS)升级建造超导直线加速器,分别用能量为 4 GeV 的 LCLS-II 电子束运行在谐波频率的情况和能量为 8 GeV 的 LCLS-II-HE 电子束运行在基频的情况模拟自由电子激光振荡器,获得了每脉冲 10^{10} 个光子、光谱带宽为 3 meV 的高通量输出辐射脉冲,表明了自由电子激光振荡器在可实现的电子束、波荡器和布拉格晶体参数下实施的可行性^[7]。

X 射线谐振腔类似于普通激光器的光学谐振腔,波荡器中一束脉冲电子束团产生的脉冲 X 射线辐射束向前传播,辐射束因腔镜反射而改变传播方向,并被腔镜束缚在谐振腔系统中不溢出腔外,进而构成一个开放的稳定腔系统。脉冲辐射束沿电子束方向行进经过波荡器,在与下一脉冲电子束相遇后,辐射束会收到电子束传递的能量,进行低增益放大直到饱和时输出, X 射线谐振腔为这样一个过程提供光学正反馈。通常 X 射线谐振腔按工作能量调节范围大小可分为两晶体谐振腔、四晶体谐振腔^[8]和六晶体谐振腔^[9]等。两晶体谐振腔中通常晶体布拉格反射镜位置固定或小范围转动,故谐振腔的工作能量不可调或调节范围极小。由一块掠入射镜构成的两晶体谐振腔结构可通过调节掠入射反射镜的

水平高度来小范围改变掠入射角,进而改变谐振腔中的工作能量,限制条件为入射束的掠入射角小于掠入射镜的全反射临界角,能量调节在毫电子伏特水平。2009 年, Kim 等^[1]提出了 4 块晶体布拉格反射镜能量可调 X 射线谐振腔方案,能量可调性以更大的复杂性为代价,需要 4 块晶体反射镜精确且同时进行平移和角度调整,因此对晶体转动角度的稳定性要求特别严格,角度稳定性约为 10 nrad,其后来提出的 6 块晶体布拉格反射镜谐振腔方案在 4 块晶体谐振腔方案基础上进一步增大了能量调节范围,但复杂性也随之大幅提升。

上海硬 X 射线自由电子激光装置(SHINE)^[10]是中国目前建设中的第四代光源设施,使用了一台能够产生 8 GeV 能量、1 MHz 重复频率电子束的超导直线加速器。光源设施计划建造三条光束线 FEL-I、FEL-II、FEL-III,其分别覆盖的辐射光子能量范围为 3~15 keV、0.4~3.0 keV、10~25 keV。SHINE 所产生的高能、高频、高品质电子束和总长为 200 m 的波荡器是设计研究 XFEL 的基础。晶体布拉格反射镜选择的衍射原子面布拉格能量 E_H 多在光束线 FEL-I 辐射光子能量范围(3~15 keV)内,进而可参考光束线 FEL-I 中电子束和波荡器参数进行 X 射线谐振腔光学系统设计。在参考已知的波荡器参数和脉冲电子束团参数后,明确谐振腔光学系统中各光学元件对脉冲辐射束控制的影响。

2 设计原理

XFEL 的运行原理^[10]为:1)超导直线加速器产生高能、高频脉冲电子束团,经偏转磁铁引入谐振腔结构中,在经过波荡器产生 X 光脉冲辐射束后,电子束团经偏转磁铁引出丢弃;2)脉冲辐射束被反射镜反射和透镜聚焦后被限制在谐振腔内往复循环,再次通过波荡器时与下一脉冲电子束团重叠进行相互作用交换能量, X 光脉冲低增益放大,进而实现振荡。当谐振腔内脉冲辐射束功率不断增益放大达到饱和时,部分脉冲辐射束穿过下游反射镜向腔外输出。

当脉冲电子束团与脉冲辐射束重叠最大化时,自由电子激光增益达到最大。因此,谐振腔设计时需考虑优化脉冲电子束团与脉冲辐射束的束流性质,脉冲电子束团和脉冲辐射束束流重叠度越高,增益越大。对脉冲电子束团与脉冲辐射束分别进行横向优化和纵向优化。横向方面:1)利用分段波荡器之间的四极磁铁构成的四极磁铁周期(FODO)结构

控制脉冲电子束横向分布^[10]; 2) 利用晶体布拉格反射镜、复合折射透镜(CRL)和掠入射反射镜等聚焦元件控制脉冲辐射束的横向束斑尺寸和发射度。纵向方面: 1) 脉冲电子束团到达波荡器的时间抖动影响重叠因子大小, 纵向电子束团与 X 射线束流重叠程度与脉冲电子束团长度、电子束到达时间的抖动有关; 2) 谐振腔的总长度决定脉冲辐射束在腔内传播一个来回的周期大小, 即决定脉冲辐射束的振荡频率, 谐振腔长度直接决定脉冲辐射束能否与脉冲电子束团相遇。

通过设计优化 X 射线谐振腔实现对脉冲辐射束的控制。在横向方面, 分别使用聚焦参数 Z_β 和瑞利长度 Z_R 描述电子束流和辐射束流的整体属性, 聚焦参数 Z_β 由电子束本身决定, 瑞利长度 Z_R 由谐振腔的几何结构给出。使用聚焦光学元件令辐射束的束腰产生在波荡器中心处, 通过使波荡器中心位置处的瑞利长度 Z_R 与电子束流的 Z_β 匹配实现最大化自由电子激光增益, 通常令 $Z_R \approx Z_\beta \approx N_\mu \lambda_\mu / (2\pi)$ 使脉冲辐射束单次通过谐振腔的自由电子激光增益最大化^[11], 其中 N_μ 为波荡器周期数, λ_μ 为波荡器周期长度。在纵向方面, 令谐振腔总长度 L_R (辐射束在腔内行进一圈回到初始位置时经过的路程) 决定的辐射束振荡频率与脉冲电子束团的重复频率 ν_e 相匹配, 得到的关系式为

$$n \cdot L_R = \frac{c}{\nu_e}, \quad (1)$$

式中: c 为真空中的光速; $n=1, 2, 3, \dots$ 。

X 射线谐振腔设计的另一个要求为波荡器中产生的脉冲辐射束在腔内稳定振荡, 即 X 射线束在腔内任意往返多次都不会横向逸出腔外, 如图 1 所示。由于自由电子激光产生的脉冲辐射束具有一定的尺寸和发散度, 并且与电子束团束流品质有关, 晶体布拉格反射镜又要求较小的衍射接收角, 因此需在光路中添加 CRL 或掠入射反射镜等起到辐射束聚焦作用的光学元件。腔内的脉冲辐射束具有一定的尺寸和发射度, 在一个长度为百米量级的振荡光路中, 添加光学元件聚焦辐射束以保证光腔的横向稳定性。

通过对脉冲辐射束在腔内往返传播过程的分析, 讨论谐振腔横向稳定性。若脉冲辐射束传播过程中整体沿光轴附近传播且偏离光轴的角度很小(满足傍轴条件), 则光学元件对辐射束的作用可等效为对辐射场进行线性变换(忽略非理想元件、非线性效应引起的作用)。因此, 可用矩阵方法(ABCD

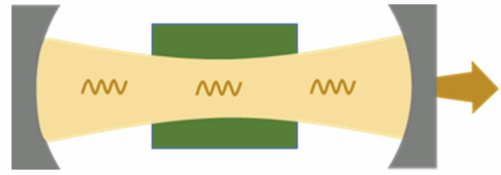


图 1 X 射线谐振腔示意图

Fig. 1 Schematic diagram of X-ray resonant cavity

矩阵法)^[12]来分析 X 射线在腔内横向分布的传播模式。X 射线束偏离光轴的位置和方向偏差大小可通过矩阵形式表示, 即

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x'_1 \end{bmatrix} = \mathbf{M}_T \begin{bmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{bmatrix}, \quad (2)$$

式中: $\mathbf{M}_T = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$ 为传输矩阵; x_0 和 x'_0 分别是起始位置处脉冲辐射束偏离光轴的位置和散角; x_1 和 x'_1 分别为目标位置处脉冲辐射束偏离光轴的位置和散角。传输矩阵的本征值为 $m = (A + D)/2$, 要使谐振腔中脉冲辐射束永久稳定, 光束永不横向溢出, m 应为虚数且满足 $|m| \leq 1$ 。通过计算不同谐振腔系统的传输矩阵 \mathbf{M}_T , 获得光学谐振腔稳定运行的条件, 进而得到保持谐振腔稳定模式的相关光学元件的参数范围。

3 谐振腔光学系统

表 1 给出目前 SHINE 装置 FEL-I 束线站设计的波荡器和电子束流的参数数值, 其中 E_{beam} 为脉冲电子束团的能量, FWHM 为半峰全宽。对应 1 MHz 的脉冲电子束团重复频率, 根据式(1), 取 $n=1$ 。令谐振腔总长度为 $L_R=300$ m, 使得脉冲电子束团与脉冲辐射束能够在波荡器位置处于纵向方向相遇重叠。设计谐振腔光学系统以满足辐射束横向稳定性和增益最大化条件, 即使谐振腔系统传输矩阵的本征值满足 $|m| \leq 1$ 和在波荡器中心位置的辐射束瑞利长度 Z_R 与电子束流的 Z_β 相匹配 ($Z_R \approx Z_\beta \approx 12$ m)。参数 m 和瑞利长度 Z_R 随透镜的焦距 f 和间距 S 的变化而变化。

虽然两晶体反射镜构成的谐振腔的能量调节范围极大受限, 但是相较其他多晶体腔复杂性更小、结构更简单、稳定性要求更低, 且易于实现, 故作为本文初次谐振腔设计尝试使用。谐振腔腔镜的材料为布拉格晶体, 其布拉格衍射效率与晶体种类、晶体厚度、衍射原子面选取和入射束波长等因素密切相关。金刚石和单晶硅是常用的作为 X 射线晶体反射镜的材料。单晶硅易于制备获取, 金刚石晶体具有高

布拉格衍射效率和优异的物理性质,进而金刚石晶体被视为制造晶体布拉格反射镜的最佳材料。金刚石和硅晶体具有类似的面心立方对称结构,当辐射束从法线方向入射时会产生多光束衍射,进而带来衍射能量损失,因此这两种材料适用于辐射束偏离晶体法线方向入射的谐振腔系统。蓝宝石单晶的硬度仅次于金刚石,其高温稳定性好且光学性能优良。使用蓝宝石晶体作为反射镜材料,其六方晶格结构可有效避免沿原子面法线方向入射 X 射线的多光束衍射效应,使谐振腔能够在沿晶体法线入射方向形成振荡^[13]。蓝宝石晶体可将正入射的辐射束高效率地反射回入射方向,因此沿晶面正入射方向使用两块晶体布拉格反射镜即可构成振荡光路。正入射的两晶体布拉格反射镜无需再使用掠入射反射镜偏折光路,一般在百米量级长度的谐振腔光路中仅考虑使用透镜聚焦辐射束。常用的聚焦手段为使用 CRL,还可以通过引入外力的方式将晶体布拉格反射镜制成弯晶^[14],在反射的同时聚焦 X 射线束,缺点是全聚焦曲面晶体制作工艺复杂且成品率低。

采用由两块平面晶体构成的晶体布拉格反射镜和两块抛物面 CRL 组成的对称谐振腔系统,其光学元件布局如图 2 所示,脉冲电子经二极磁铁由外部引入谐振腔中,在波荡器中振荡产生脉冲辐射后,电子经过二极磁铁导出外部。其中, C₁ 和 C₂ 分别为下游布拉格反射镜和上游布拉格反射镜, L₁ 和 L₂ 分别为靠近下游布拉格反射镜和上游布拉格反射镜

的 CRL。以该谐振腔为模型讨论 X 射线谐振腔设计参数。以波荡器中心位置为起始位置产生的脉冲辐射束在谐振腔中向前传播,脉冲辐射束经过两次布拉格反射镜反射后回到起始位置,该过程视为一个振荡周期。图 3 给出了辐射束在谐振腔中传输的周期分布情况,波荡器中产生的辐射束振荡一个周期从左到右依次经过 L₁ 和 C₁,经 C₁ 反射后通过 L₁ 返回,再依次经过 L₂ 和 C₂,经 C₂ 反射后通过 L₂,随后返回初始位置。六边形区域表示辐射束经过时尺寸与散角的变化。其中, ω₁ 为波荡器的中心位置, ω₂ 为谐振腔的中心位置(ω₁ 与 ω₂ 位置重合,但光线经过 ω₁ 与 ω₂ 时方向相反),透镜焦距为 f₁ = f₂ = f, s₁ 为波荡器中心位置到 CRL 的距离, s₂ 为 CRL 到晶体反射镜的距离,两透镜间距为 S = 2s₁, 脉冲辐射束在谐振腔中振荡一次的总长度为 L_R = 4(s₁ + s₂)。

表 1 波荡器、电子束流和 FEL-I 光源的参数

Table 1 Parameters of undulator, electron beam and FEL-I source

Parameter	Value
$E_{\text{beam}}/\text{GeV}$	8
λ_{μ}/cm	2.6
N_{μ}	3000
ν_e/MHz	1
FWHM of source size / μm	50
FWHM of source divergence / μrad	1.3
Pulse energy / μJ	34

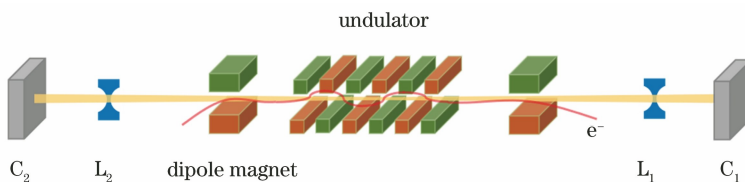


图 2 谐振腔系统光学元件布局

Fig. 2 Layout of optical components in resonant cavity system

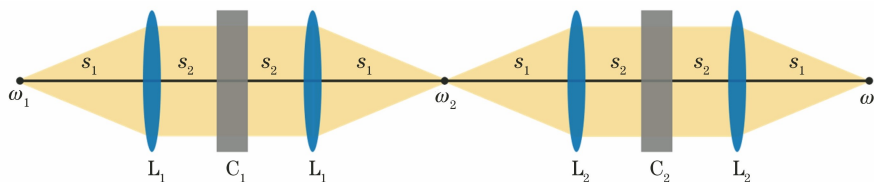


图 3 辐射束在谐振腔中传输的周期分布

Fig. 3 Periodic distribution of radiation beam propagating in resonant cavity

通过图 3 计算谐振腔传输矩阵,根据谐振腔的对称性,首先简化计算半个谐振腔距离 ω₁ω₂ 的传输矩阵,再得到整个谐振腔长度的传输矩阵。通常光线通过长度为 l 的漂移段和通过焦距为 f 的薄透

镜时传输矩阵可分别写成 $L(l) = \begin{bmatrix} 1 & l \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ 和 $F = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1/f & 1 \end{bmatrix}$ 。因此,谐振腔传输矩阵可表示为

$$\mathbf{M}_R = \mathbf{L}(s_1)\mathbf{FL}(2s_2)\mathbf{FL}(2s_1)\mathbf{FL}(2s_2)\mathbf{FL}(s_1) = \begin{bmatrix} 8X_1^2X_2^2 - 8X_1X_2 + 1 & -8fX_1^3X_2^2 + 12fX_1^2X_2 - 4fX_1 \\ -\frac{8X_1X_2^2}{f} + \frac{4X_2}{f} & 8X_1^2X_2^2 - 8X_1X_2 + 1 \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中： $X_1 = 1 - s_1/f$ ； $X_2 = 1 - s_2/f$ 。由式(3)可得，本特征值的表达式为 $m = 8X_1^2X_2^2 - 8X_1X_2 + 1$ ，稳定条件为 $-1 \leq m \leq 1$ ，化简得到 $0 \leq (1 - s_1/f)(1 - s_2/f) \leq 1$ ，故对于稳定条件，首先要满足 $s_1 \geq f$ 且 $s_2 \geq f$ 或 $s_1 \leq f$ 且 $s_2 \leq f$ 。

假设在束缚在腔中的脉冲辐射束在腔内多次往返传播的过程中，束流尺寸、散角和它们之间的相关性皆是周期性的，以辐射束在腔内往返一次作为周期。在理想情况下，传播一个周期后脉冲辐射束的最终状态和初始状态应相同，即 $\begin{bmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{bmatrix}_{\text{out}} =$

$\mathbf{M}_T \begin{bmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{bmatrix}_{\text{in}}$ 。用二阶矩阵描述整个脉冲辐射束的束流属性，输出平面处的二阶矩阵 \mathbf{S}_{out} 与输入平面处的二阶矩阵 \mathbf{S}_{in} 的关系^[12]为

$$\mathbf{S}_{\text{out}} = \begin{bmatrix} \langle x^2 \rangle & \langle xx' \rangle \\ \langle x'x \rangle & \langle (x')^2 \rangle \end{bmatrix}_{\text{out}} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} \langle x^2 \rangle & \langle xx' \rangle \\ \langle x'x \rangle & \langle (x')^2 \rangle \end{bmatrix}_{\text{in}} \mathbf{M}^T = \mathbf{M}\mathbf{S}_{\text{in}}\mathbf{M}^T, \quad (4)$$

式中： \mathbf{M} 为辐射束腔内传播一个周期的传输矩阵； x 为水平方向辐射束束斑尺寸； x' 为水平方向辐射束发射度； $\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j$ 表征了包含大量粒子的整体束流的属性，其中 N 为粒子总数。

基于图 2 中谐振腔几何结构和传输矩阵 \mathbf{M}_R ，利用式(4)计算该谐振腔系统波荡器中心位置束腰 ω_1 处的瑞利长度 Z_{R_1} ，得到

$$Z_{R_1}^2 = \frac{\langle x^2 \rangle}{\langle (x')^2 \rangle} = \frac{f^2 X_1 (1 - X_1 X_2)}{X_2}. \quad (5)$$

计算另一个束腰中心 ω_2 处的瑞利长度 Z_{R_2} 和下游布拉格反射镜 C_1 处辐射束的瑞利长度 Z_{R_3} ，二者的表达式为

$$Z_{R_2}^2 = \frac{f^2 X_1 (1 - X_1 X_2)}{X_2} = Z_{R_1}^2, \quad (6)$$

$$Z_{R_3}^2 = \frac{f^2 X_2 (1 - X_1 X_2)}{X_1} = \left(\frac{X_2}{X_1}\right)^2 Z_{R_1}^2, \quad (7)$$

化简式(7)后可得

$$Z_{R_3} = \frac{f - s_2}{f - s_1} Z_{R_1}. \quad (8)$$

由式(6)可知，束腰 ω_1 和 ω_2 处的辐射束瑞利长度相等，波荡器中束腰 ω_1 处的瑞利长度与透镜焦距和各元件间距位置有关，取 $Z_{R_1} \approx Z_\beta$ 使自由电子激光增益最大化。晶体反射镜位置处的瑞利长度 Z_{R_3} 决定了辐射束到达晶体处布拉格衍射辐射接收角的大小，从而影响晶体的衍射带宽。与波荡器中心处的瑞利长度 Z_{R_1} 相比， Z_{R_3} 的取值范围更大，可通过增大 Z_{R_3} 来减小辐射束到达晶体反射镜处的辐射散角，因此有 $s_1 \gg s_2$ 。

为满足稳定性条件，由腔长和式(3)可得出 m 值随透镜焦距 f 和透镜间距 S 的变化关系，如图 4 所示，右图为左图中点划线方框内的区域。色度条表征 m 值大小，虚线对应 $|m| = 1$ ，虚线内的区域为谐振腔横向稳定区域。由上文可知， s_1, s_2 与 f 之间满足 $s_1 \geq f$ 且 $s_2 \geq f$ 或 $s_1 \leq f$ 且 $s_2 \leq f$ 。同时，

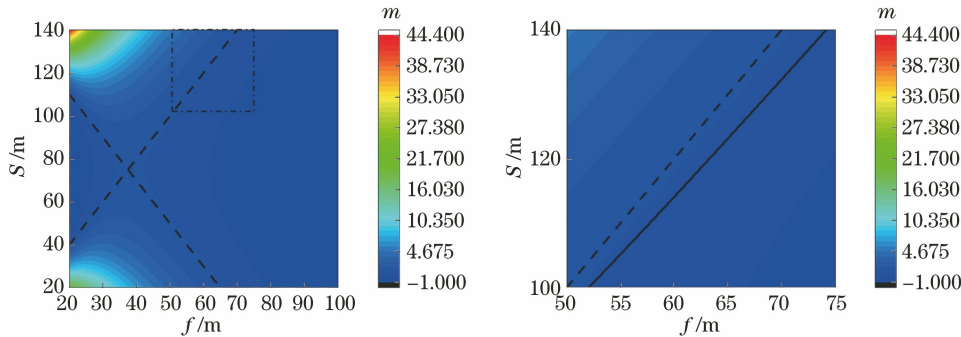


图 4 m 随 CRL 的间距和焦距的变化及局部放大图

Fig. 4 m varying with spacing and focal length of CRL and local magnification

$s_1 \gg s_2$ 且 $s_1 + s_2 = 75$ m。因此,两块透镜间距满足 $100 \text{ m} < S < 150 \text{ m}$ 。根据表 1 波荡器参数计算波荡器中电子束聚焦参数,得到 $Z_\beta \approx 12$ m。根据增益最大化优化条件,有 $Z_{R_1} \approx Z_\beta \approx 12$ m。根据式(5),得到透镜焦距 f 与间距 S 的确定关系,如图 4 右图中的实线段所示。实线段上及其附近点的取值均满足稳定条件和增益最大化条件。表 2 给出透镜间距分别取 100, 110, 120 m 时谐振腔参数的情况。

为聚焦高能 X 射线束,采用铍材料抛物面型 CRL,当入射光子能量为 14.3 keV [蓝宝石晶体 (0 0 0 30) 面的布拉格能量] 时,相应的 X 射线折射率因子为 $\delta = 1.66 \times 10^{-6}$ 、线性衰减系数为 $\mu = 0.606 \text{ cm}^{-1}$ 。使用透镜片数为 1,透镜厚度为 $D = 2$ mm,透镜最小厚度为 $d = 300 \mu\text{m}$ 。曲率半径 R 、开口半径 R_0 、透射率 T_P 与透镜焦距 f 的关系由表 2 给出,由此得到腔内各元件的位置和间距,以及这一参数取值下谐振腔中各元件处辐射束的瑞利长度大小。

表 2 谐振腔系统参数

Table 2 Parameters of resonant cavity system

Parameter	100 m	110 m	120 m
L_R/m	300	300	300
f/m	51.7	57.2	62.5
$R/\mu\text{m}$	172.37	190.70	208.38
$R_0/\mu\text{m}$	541.32	569.38	595.18
T_P	0.9331	0.9331	0.9331
s_1/m	50	55	60
s_2/m	25	20	15
Z_{R_1}/m	12	12	12
Z_{R_3}/m	188.5	202.9	228.0

4 性能模拟

4.1 蓝宝石晶体反射率模拟

以 SHINE 的光束线为基础设计构造 XFEL0,采用蓝宝石晶体作为对称构造谐振腔的晶体反射镜。参考相关资料^[13],寻找在能量 14 keV 附近,对于一束正入射衍射面的理想 X 射线能够发生布拉格衍射并且拥有较高峰值反射率 ($>90\%$) 的原子面。资料显示 (0 9 $\bar{9}$ 0) 和 (0 0 0 30) 原子面布拉格衍射峰值反射率分别为 94% 和 95%,满足高反射率要求。在实际制备反射镜样镜时,晶向为 c-plane 的蓝宝石晶棒中 (0 0 0 30) 面相较于 (0 9 $\bar{9}$ 0) 面晶体在进行定向和切割时更容易操作。综合上述因素,采用反射率更高的 (0 0 0 30) 面作为晶体反射镜的衍射原子面。

使用动力学衍射理论计算蓝宝石晶体布拉格衍射的反射率。假设晶体材料具有完美晶格结构,在室温 (300 K) 下,晶格常数为 $a = 0.4759 \text{ nm}$, $c = 1.2991 \text{ nm}$ 。蓝宝石原子面 (0 0 0 30) 的布拉格能量为 $E_H = 14.3158 \text{ keV}$ ($E_H = hc/2d_H$, 其中 h 为普朗克常数, d_H 为面间距), 晶体对称切割布拉格衍射几何下非对称因子为 $\gamma = -1$, X 射线沿晶面法线方向入射晶体。蓝宝石晶体中各元素的有效德拜温度分别为 $\theta_{D,Al} = 890 \text{ K}$ 和 $\theta_{D,O} = 995 \text{ K}$, 在室温条件下计算得到的德拜-沃勒因子分别为 0.7682 和 0.6902, 从而得到电极化率参数^[13], 即 $\chi_0 = (-7.951 + i2.8986) \times 10^{-6}$, $\chi_H = (8.6715 - i0.2032) \times 10^{-7}$, $\chi_{\bar{H}} = \chi_H$ 。利用 MATLAB 程序得到不同晶体厚度下经布拉格修正后的反射率和透射率曲线,如图 5 所示。其中, E 为入射 X 射线能量, E_C 为全反射区域的中心能量, d_c 为晶体消光长度 (此处取值为 $16 \mu\text{m}$)。

从图 5 中可以发现,在晶体厚度满足 $d > 10d_c$ 后,反射率曲线不会有较大变化,反射率曲线带宽约为 13 meV,峰值反射率 (R_{Peak}) 稳定在 0.953 左右。谐振腔上游晶体反射镜只承担反射镜功能,晶体越厚反射率越高,对于工作能量区域, X 射线的透射率为零。同时,考虑晶体散热情况,晶体越薄,将热量传导到环境的速度就越快,而且可以实现较低的稳定温度。参考晶体峰值反射率随厚度的变化关系,给定上游晶体厚度的合理区间为 $200 \sim 400 \mu\text{m}$ 。谐振腔下游晶体反射镜作为输出耦合元件在保证较高反射率的基础上应适当降低晶体厚度,提高工作能量区内辐射束的透射率,输出饱和功率下的脉冲辐射束,合适的晶体厚度区间为 $70 \sim 75 \mu\text{m}$,在此厚度区间内晶体的透射率为 $3\% \sim 4\%$,峰值反射率在 90% 以上。

4.2 谐振腔系统光学追迹模拟

使用 X 射线追迹软件 SHADOW 对已确定的晶体参数和表 2 中所列谐振腔参数决定的谐振腔系统进行 X 射线追迹模拟。根据表 1,设定 X 射线辐射源横向 FWHM 尺寸为 $50 \mu\text{m}$,横向发射度为 $1.3 \mu\text{rad}$ 。以波荡器中心位置处产生脉冲辐射束为起始,以脉冲辐射束在谐振腔中振荡一个周期返回波荡器中心位置与下一脉冲电子束重叠为结束。模拟观测辐射束在谐振腔系统中各个元件处的横向束斑状态,并记录此时损耗的大小。不同 S 下各个元件位置处的束斑尺寸和发射度模拟结果如表 3~5 所示,其中 z 为垂直方向的辐射束束斑尺寸, z' 为垂直方向的辐射束发射度。辐射脉冲在腔内振荡一周

的整体损耗为 18.7%。辐射束在腔内往返一次,理想情况下尺寸和发射度都是周期性的,因此透镜间

距为 $S = 100\text{ m}$ 的设计参数使谐振腔性能相较于 110 m 和 120 m 的情况更优异。

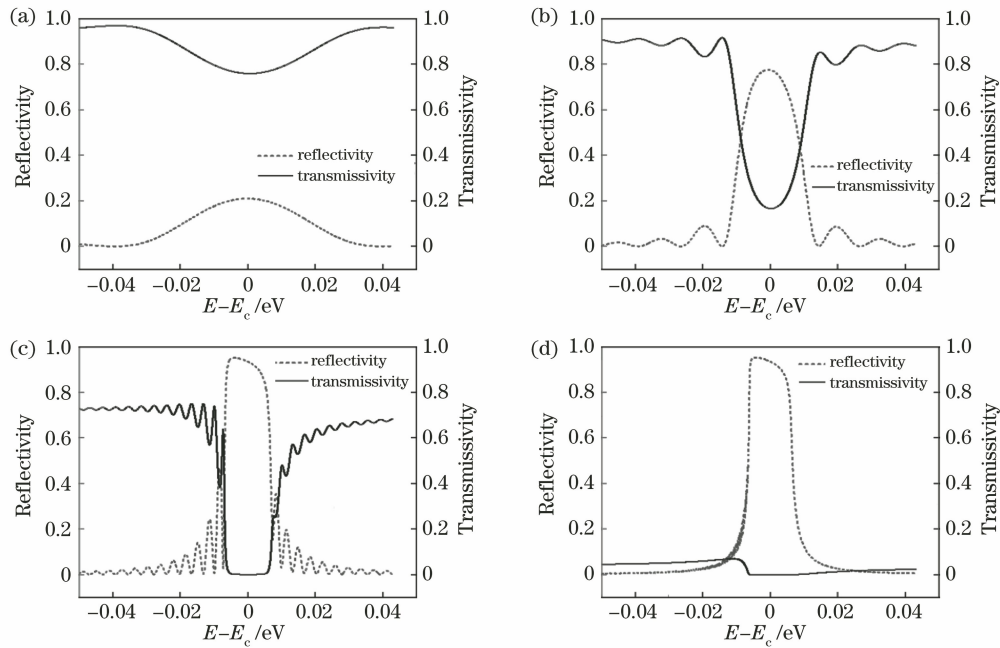


图 5 不同 d 下 $(0\ 0\ 0\ 30)$ 原子面布拉格反射率和透射率曲线。(a) $d = d_c$; (b) $d = 3d_c$; (c) $d = 10d_c$; (d) $d = 100d_c$ 。

Fig. 5 Bragg reflectivity and transmissivity curves of $(0\ 0\ 0\ 30)$ plane under different d . (a) $d = d_c$; (b) $d = 3d_c$; (c) $d = 10d_c$; (d) $d = 100d_c$ 。

表 3 $S = 100\text{ m}$ 时一个传播周期中每个元件位置处的束斑尺寸和发射度的光学追迹模拟结果

Table 3 Optical tracing simulation results of beam spot size and emittance at each element location in one propagation period when $S = 100\text{ m}$

Parameter	Undulator	C_1	Resonant cavity	C_2	Undulator
FWHM of $x / \mu\text{m}$	50.00	64.91	47.88	86.08	44.20
FWHM of $z / \mu\text{m}$	50.00	64.15	48.13	84.42	42.69
FWHM of $x' / \mu\text{rad}$	1.30	0.96	1.33	0.93	2.02
FWHM of $z' / \mu\text{rad}$	1.30	0.92	1.36	0.85	1.97

表 4 $S = 110\text{ m}$ 时一个传播周期中每个元件位置处的束斑尺寸和发射度的光学追迹模拟结果

Table 4 Optical tracing simulation results of beam spot size and emittance at each element location in one propagation period when $S = 110\text{ m}$

Parameter	Undulator	C_1	Resonant cavity	C_2	Undulator
FWHM of $x / \mu\text{m}$	50.00	69.49	46.97	105.33	40.71
FWHM of $z / \mu\text{m}$	50.00	71.05	47.30	102.90	37.70
FWHM of $x' / \mu\text{rad}$	1.30	0.87	1.47	0.81	2.23
FWHM of $z' / \mu\text{rad}$	1.30	0.87	1.47	0.78	2.27

表 5 $S = 120\text{ m}$ 时一个传播周期中每个元件位置处的束斑尺寸和发射度的光学追迹模拟结果

Table 5 Optical tracing simulation results of beam spot size and emittance at each element location in one propagation period when $S = 120\text{ m}$

Parameter	Undulator	C_1	Resonant cavity	C_2	Undulator
FWHM of $x / \mu\text{m}$	50.00	76.90	48.57	115.56	40.12
FWHM of $z / \mu\text{m}$	50.00	76.55	44.60	112.68	37.34
FWHM of $x' / \mu\text{rad}$	1.30	0.79	1.54	0.72	2.45
FWHM of $z' / \mu\text{rad}$	1.30	0.80	1.52	0.69	2.37

5 讨 论

设计和实现 X 射线波段谐振腔,首先要找到能够高效率反射 X 射线的反射镜材料。布拉格晶体解决了对 X 射线高反射率要求的难题。通过衍射动力学理论计算布拉格晶体某些晶面在需求的 X 射线能量范围内在特定 X 射线入射角度下的理论反射率曲线,根据曲线的峰值大小和带宽等特征,可以找到合适的晶体类型。在自由电子激光振荡器中,晶体反射镜每秒需面对上百万个高功率的脉冲辐射束,故产生的辐射损伤和热负载是布拉格晶体作为光学腔镜在实际运用中必须考虑的问题,否则反射镜将难以承担其物理功能。通过数值模拟可以讨论晶体的热负载效应,从而对环境温度、反射镜晶体的尺寸、辐射脉冲的能量和重复频率提出要求^[15]。然而,在实验验证上无法找到高功率、高重复频率的脉冲辐射源,可通过以激光器的光源等效为 X 射线脉冲光源的实验来讨论这种热负载效应^[16],因此相关问题有待进一步研究。

除了要解决 X 射线谐振腔中反射镜晶体本身的辐射损伤和热负载引起的晶格形变等问题,还要保持振动稳定性。谐振腔工作时可能由于外界因素造成谐振腔内某一元件(晶体反射镜、CRL)移动,偏离其原本位置进而影响振荡光路的稳定性,因此在谐振腔中添加光路反馈系统是有必要的。下游反射晶体为能量输出晶体,其振动稳定性直接影响耦合输出功率,以其为代表讨论晶体角度未对准情况对谐振腔振荡光路的影响。假设下游晶体反射镜有角度为 $\Delta\theta$ 的未对准角,即与理想角度有 $\Delta\theta$ 的偏离,产生了光束位置相对光轴的位置偏移量 Δx 和角度偏移量 $\Delta x'$ 。因此,在谐振腔中传输矩阵对应位置处添加一个 $2\Delta\theta$ 角以确定影响关系^[17],即

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta x' \end{bmatrix} &= \mathbf{M}_{T_2} \left(\mathbf{M}_{T_1} \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta x' \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 2\Delta\theta \end{bmatrix} \right) = \\ \mathbf{M}_R \begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta x' \end{bmatrix} &+ \mathbf{F}(s_1) \mathbf{FL}(2s_2) \mathbf{FL}(2s_1) \mathbf{FL}(s_2) \times \\ &\begin{bmatrix} 0 \\ 2\Delta\theta \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (9)$$

式中: \mathbf{M}_{T_1} 和 \mathbf{M}_{T_2} 分别为未对准晶体位置之前和未对准晶体位置之后的光路传输矩阵。对于图 2 所示的谐振腔系统,下游晶体反射镜未对准角 $\Delta\theta$ 、产生的位置偏移量 Δx 和角度偏移量 $\Delta x'$ 的关系经化简后可表示为

$$\begin{bmatrix} \Delta x \\ \Delta x' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/f \\ -1/(2X_1) \end{bmatrix} \cdot \Delta\theta. \quad (10)$$

基于光束线 FEL-I,光源参数由表 1 给出,其饱和辐射束尺寸的 FWHM 为 $50 \mu\text{m}$,其辐射束发散度的 FWHM 约为 $1.3 \mu\text{rad}$ 。通常角度误差带来的光线在位置和角度上的偏移量应小于辐射束横向尺寸和角度发散的 $1/10$ 。此时, $\Delta x < 5 \mu\text{m}$, $\Delta x' < 0.13 \mu\text{rad}$ 。将上述条件代入式(10)中分别计算出对应的晶体未对准角度大小,得到条件 $\Delta\theta < 193.4 \text{ nrad}$, $\Delta\theta < 10 \text{ nrad}$,故外界引起的振动造成的下游晶体反射镜偏离对准位置角度 $\Delta\theta$ 应小于 10 nrad 。整个谐振腔内振荡光路的振动稳定性应维持在几十纳弧度量级。

6 结 论

以 SHINE 设施中加速器的参数和 FEL-I 光束线中波荡器的设计指标为参考,设计了基于蓝宝石晶体作为反射镜材料的 X 射线谐振腔。谐振腔总长度为 300 m ,使用蓝宝石(0 0 0 30)面作为衍射原子面,工作能量为 14.3 keV ,能量分辨率为 10^{-6} 。明确提出谐振腔系统设计参数,在对使用的晶体反射镜振动稳定性进行分析后,提出 $\Delta\theta < 10 \text{ nrad}$ 的环境稳定性要求。对提出的谐振腔结构参数进行 X 射线追迹模拟,结果显示,该谐振腔光路能够较好地调控 X 光脉冲的均方根尺寸和发射度, X 光脉冲单次通过谐振腔光路的整体损耗小于 20% 。模拟结果验证了以蓝宝石作为布拉格晶体使用在自由电子激光振荡器装置中使辐射束形成稳定振荡的可行性,为将来 SHINE 装置自由电子激光振荡器研究提供了参考。

参 考 文 献

- [1] Kim K J, Shvyd'ko Y V, Reiche S. A proposal for an X-ray free-electron laser oscillator with an energy-recovery linac [J]. *Physical Review Letters*, 2008, 100(24): 244802.
- [2] Huang Z R, Ruth R D. Fully coherent X-ray pulses from a regenerative-amplifier free-electron laser [J]. *Physical Review Letters*, 2006, 96(14): 144801.
- [3] Madey J, Scully M O, Sprangle P. The free electron laser: conceptual history [J]. *Physica Scripta*, 2016, 91(8): 083003.
- [4] Deacon D A G, Elias L R, Madey J M J, et al. First operation of a free-electron laser [J]. *Physical Review Letters*, 1977, 38(16): 892-894.
- [5] Colella R, Luccio A. Proposal for a free electron

- laser in the X-ray region [J]. Optics Communications, 1984, 50(1): 41-44.
- [6] Shvyd'ko Y V, Stoupin S, Cunsolo A, et al. High-reflectivity high-resolution X-ray crystal optics with diamonds[J]. Nature Physics, 2010, 6(3): 196-199.
- [7] Qin W, Huang S, Liu K X, et al. Start-to-end simulations for an X-ray FEL oscillator at the LCLS-II and LCLS-II-HE[C]//38th International Free Electron Laser Conference, August 20-25, 2017, Santa Fe, NM, USA. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2018: TUC05.
- [8] Kim K J, Shvyd'ko Y V. Tunable optical cavity for an X-ray free-electron-laser oscillator[J]. Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams, 2009, 12(3): 030703.
- [9] Freund H P, van der Slot P J M, Shvyd'ko Y V. An X-ray regenerative amplifier free-electron laser using diamond pinhole mirrors [J]. New Journal of Physics, 2019, 21(9): 093028.
- [10] 李凯. X 射线自由电子激光振荡器的理论研究[D]. 上海: 中国科学院上海应用物理研究所, 2018: 60-67.
- Li K. The theoretical study of X-ray free-electron laser oscillator[D]. Shanghai: Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, 2018: 60-67.
- [11] Lindberg R R, Kim K J. Mode growth and competition in the X-ray free-electron laser oscillator start-up from noise [J]. Physical Review Special Topics: Accelerators and Beams, 2009, 12(7): 070702.
- [12] Kim K J, Huang Z R, Lindberg R. Synchrotron radiation and free-electron lasers: principles of coherent X-ray generation [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
- [13] Shvyd'ko Y V. X-ray optics [M]. Heidelberg: Springer, 2004.
- [14] Yamamura K, Ueda K, Nagano M, et al. Fabrication of damage-free Johansson-type doubly curved crystal spectrometer substrate by numerically controlled local wet etching[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2010, 616(2/3): 281-284.
- [15] Song M Q, Zhang Q M, Guo Y H, et al. Numerical modeling of thermal loading of diamond crystal in X-ray FEL oscillators[J]. Chinese Physics C, 2016, 40(4): 048101.
- [16] Maag C, Bahns I, Rossbach J, et al. An experimental setup for probing the thermal properties of diamond regarding its use in an XFEL[C]//38th International Free Electron Laser Conference, August 20-25, 2017, Santa Fe, NM, USA. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2018: MOP064.
- [17] Lindberg R R, Kim K J, Shvyd'ko Y, et al. Performance of the X-ray free-electron laser oscillator with crystal cavity [J]. Physical Review Special Topics: Accelerators and Beams, 2011, 14(1): 010701.