



·激光数值仿真·

上海软 X 射线自由电子激光外种子运行模式的模拟研究*

范伟杰^{1,2}, 冯超³, 赵明华¹

(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: 上海软 X 射线自由电子激光用户装置(SXFEL)是我国首台可以运行在水窗波段的自由电子激光装置, 未来可以为 5 个实验线站供光, 其主要运行模式为自放大自发辐射模式以及外种子模式。本文就 SXFEL 的外种子模式进行了从头到尾的模拟研究, 主要包括 EEHG-HGHG 混合级联与单级 EEHG 两种方案。模拟结果表明, 虽然 EEHG-HGHG 混合级联模式较为复杂, 但能够产生更高功率的高次谐波辐射。除此之外, 我们还研究了各种三维效应对 EEHG 的影响。模拟和分析结果表明, 通过上述两种方案, 采用紫外波段的种子激光, 用户可以得到全相干、窄带宽、短脉冲的水窗波段自由电子激光。

关键词: 自由电子激光; 高次谐波放大; 回声谐波放大; 全相干; 窄带宽

中图分类号: TL53

文献标志码: A doi: 10.11884/HPLPB202234.210262

Simulation studies of external seeding schemes for Shanghai soft X-ray free electron laser

Fan Weijie^{1,2}, Feng Chao³, Zhao Minghua¹

(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: Shanghai Soft X-ray Free Electron Laser User Facility (SXFEL-UF) is the first X-ray FEL in China that can produce coherent radiation in the water-window regime. The main working modes of SXFEL are self-amplified spontaneous emission and external seeding schemes. This paper mainly focuses on the start to end simulations of the external seeding schemes including echo-enabled harmonic generation-high gain harmonic generation cascade (EEHG-HGHG cascade) and single stage echo-enabled harmonic generation (EEHG). 3D simulations indicates that these external seeding schemes can generate coherent X-ray radiation at soft X-ray regime directly from a conventional UV seed laser.

Key words: free electron laser, high gain harmonic generation, echo-enabled harmonic generation, fully coherent, narrow-bandwidth

21 世纪以来, 随着直线加速器技术的发展, 许多高增益自由电子激光装置已经建成并投入运行, 如美国的 LCLS^[1-3]、日本的 SCALA^[4]、韩国的 PAL^[5]、意大利的 FERMI^[6-7] 等。我国自由电子激光研究与工程建设在国家的大力支持下正在蓬勃发展。2016 年开始建设的上海软 X 射线自由电子激光试验装置(SXFEL-TF), 是我国首台 X 射线自由电子激光装置, 该装置于 2020 年 11 月通过国家验收, 之后开始进行用户装置升级改造。改造后的上海软 X 射线自由电子激光用户装置将采用 SASE^[8] 和外种子型 FEL 的运行模式, 可以获得高相干度、高亮度、短脉冲的水窗波段^[9-10](2.34~4.4 nm)自由电子激光。

本文对上海软 X 射线自由电子激光用户装置(SXFEL-UF)的主要运行模式之一——外种子型自由电子激光模

* 收稿日期: 2021-07-08; 修订日期: 2021-11-01

基金项目: 国家自然科学基金项目(12122514, 11975300)

联系方式: 范伟杰, fanweijie@sinap.ac.cn。

通信作者: 冯超, fengchao@zjlab.org.cn。

式进行了模拟,该模式包括了级联 EEHG-HGHG 方案与单级 EEHG^[11] 方案。级联 EEHG-HGHG 方案由谐波转换次数为 30 的 EEHG 与谐波转换次数为 3 的 HGHG 所组成,其总谐波转换次数为 90;而单级 EEHG 方案的谐波转换次数将直接采用 90 次。这两种方案都可以在采用紫外波段种子激光的条件下,获得水窗波段 FEL 脉冲。

1 SXFEL 的基本设置

图 1 是上海软 X 射线自由电子激光装置的总体示意图,包含加速器段与波荡器段。其中加速器段包括光阴极注入器(RF-GUN)、主加速器和两个磁压缩段。波荡器段则包含 1 条自放大自发辐射束线以及 1 条外种子型自由电子激光束线。其中外种子型主要运行方案为级联 EEHG-HGHG(谐波次数: 30*3)与 EEHG(谐波次数 90)。级联 EEHG-HGHG 方案(如图 2 所示)包括三个调制段(modulator) M1、M2、与一节 U30 波荡器,三个色散段(dispersion section)、一个新鲜束团段(fresh-bunch chicane)和两个辐射段(radiator)。第一级 EEHG 所需的两束种子激光由一台钛宝石啁啾脉冲放大器提供,而这一阶段输出的 30 次谐波,即 8.8 nm 的自由电子激光并作为下一级 HGHG 的种子激光,最后在第二级输出 2.956 nm 的水窗波段 FEL。EEHG 方案(如图 3 所示)由两个调制段(modulator)、两个色散段(dispersion section)、一个辐射段(radiator)组成,该方案将两束 266 nm 的紫外光输入至两个调制段中与电子束相互作用,最后在调制段中产生 90 次谐波 2.956 nm 的水窗波段自由电子激光。为满足用户对于激光的需求,种子激光的波长等也是可调谐的,并具有较高的时间、能量、指向等稳定性。种子激光基于钛宝石啁啾放大器,基波输出的中心波长为 800 nm,并可以采用光学参量放大器技术产生 240~360 nm 范围内的紫外波段种子激光。

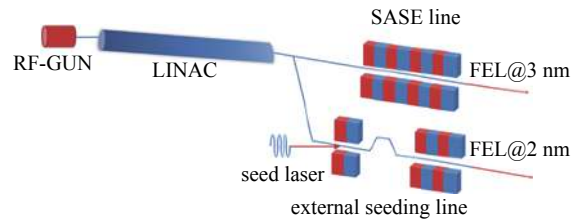


Fig. 1 Schematic layout of the SXFEL
图 1 上海软 X 射线用户装置简图

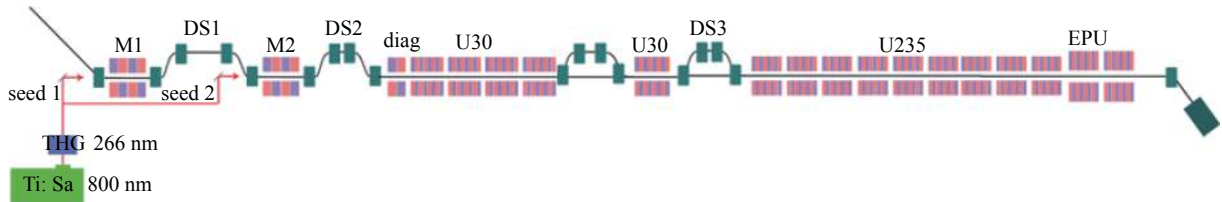


Fig. 2 Schematic layout of the cascade EEHG-HGHG mode
图 2 级联 EEHG-HGHG 模式示意图

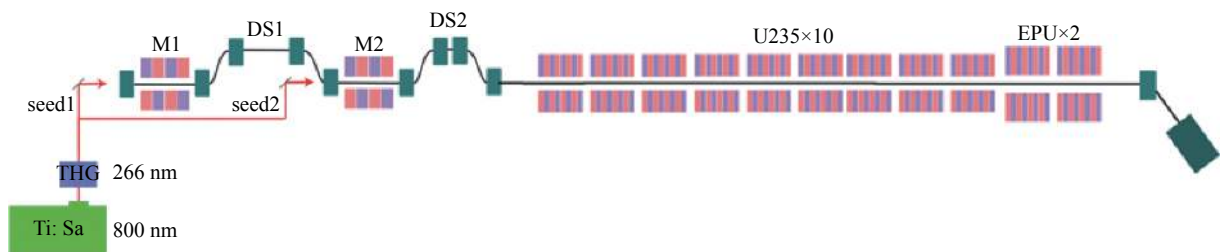


Fig. 3 Schematic layout of the single stage EEHG mode
图 3 单级 EEHG 模式示意图

2 FEL 三维模拟

表 1 为 SXFEL 用户装置模拟基本参数。模拟中使用了 ASTRA 来模拟电子束团在电子枪中的产生过程,在电子直线加速器中的加速过程则由 ELEGANT^[12] 进行模拟,最后的 FEL 放大是由三维模拟软件 GENESIS^[13] 完成。

表 1 模拟所使用的主要参数

Table 1 Main parameters in the simulations

energy/MeV	peak current/A	sliced energy spread/keV	normarized emittance/(mm mrad)
1400	800	100	1.5
bunch length/fs	power of seed lasers/MW	mudulator period numbers	mudulator period length/m
500(FWHM)	200/800	20/20/100	0.08/0.08/0.03

图 4 所示为级联 EEHG-HGHG 方案第一级的模拟结果。第一级 EEHG 的调制部位为电子束的尾部且两个调制段所引入的调制深度分别为 4 和 6, 当第一级调制深度大于 4 时, 调制所带来的群聚因子的增强效果已经不明显^[14], 继续增加调制将进一步增加电子束的能散, 导致辐射功率下降; 而第二级的调制深度过低会使色散段的强度变大, 从而使得 chicane 的整体尺寸变大, 且引入过强的三维效应, 破坏 EEHG 的相空间结构, 方案二同理。第一级 EEHG 的色散段强度分别为 3 mm 与 0.108 mm, 最后输出相干性较好的 8.8 nm FEL, 峰值功率约为 700 MW, 脉冲长度为 40 μm , 输出光谱的相对带宽(FHWM)为 0.017%。这一 FEL 输出将作为第二级 HGHG 的种子激光。电子束在经过 fresh-bunch chicane 后, 其头部将会被上一级的 FEL 所调制, 调制深度为 5, 在经过强度为 3 μm 的色散段后, 在第二个辐射段出口可获得相干性较好的 2.956 nm 的水窗波段 FEL, 其峰值功率约为 300 MW, 脉冲长度为 27 μm , 输出光谱的相对带宽(FHWM)为 0.0097%(如图 5 所示)。

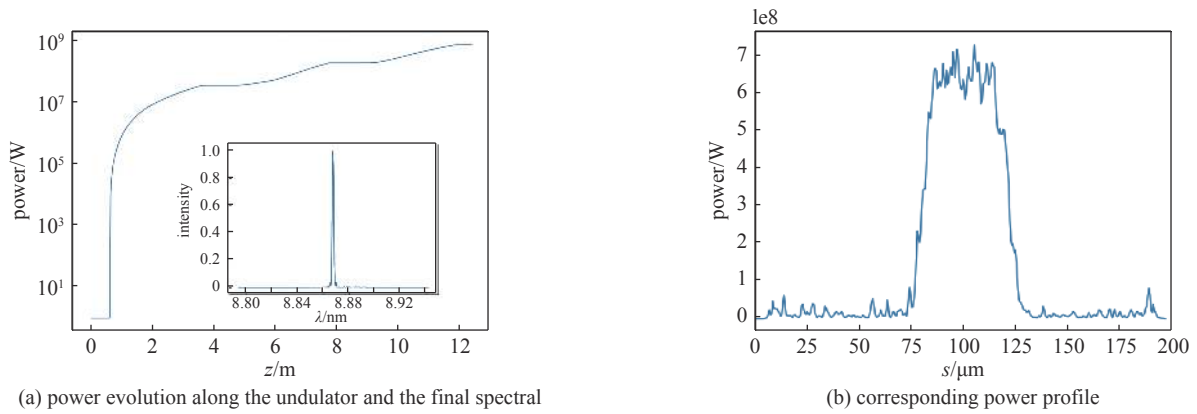


Fig. 4 Cascade EEHG-HGHG mode FEL radiation at the exit of the first radiator

图 4 级联 EEHG-HGHG 模式第一个辐射段出口的 FEL 辐射

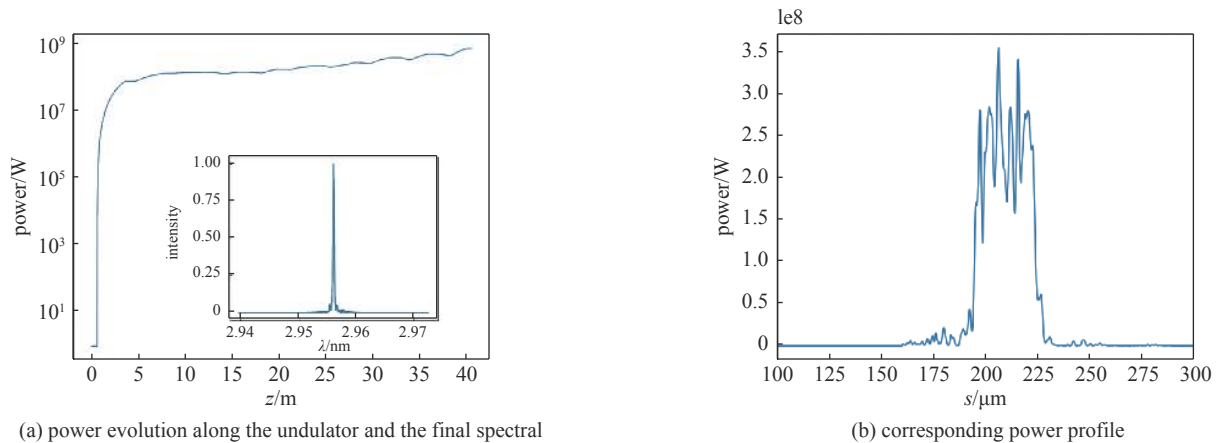


Fig. 5 Cascade EEHG-HGHG mode FEL radiation at the exit of the second radiator

图 5 级联 EEHG-HGHG 模式第二个辐射段出口的 FEL 辐射

第二种方案为单级 EEHG 模式, 这一方案的谐波转换次数为 90, 即输入 266 nm 的紫外波段激光, 在波荡器出口直接得到水窗波段的 FEL。此方案中, 两个调制段的调制深度分别为 4 和 6, 两个色散段的强度分别为 4.5 mm 与 0.103 mm。在辐射段出口可获得相干性较好的 2.956 nm 的水窗波段 FEL, 其峰值功率约为 150 MW, 脉冲长度为 21.6 μm , 输出光谱的相对带宽(FHWM)为 0.0078%(如图 6 所示)。

此外, 我们还研究了种子激光的稳定性对于两种方案的影响。在两种方案的调制段中, 种子激光的束腰一般是电子束尺寸的 5 倍左右, 种子激光较小的横向抖动对 EEHG 的影响较小, 因此我们主要模拟了激光在调制段中的到达时间抖动与峰值功率的抖动。我们探究了当两束种子激光的能量抖动为种子激光峰值功率的 $\pm 10\%$; 到达时间抖动约为 ± 30 fs 时分别对辐射的峰值功率的影响。图 7 所示为级联 EEHG-HGHG 模式, 结果表明, 种子激光的到达时间抖动 ± 15 fs 范围内的将导致约 2.7% 的 EEHG 输出的峰值功率抖动, 且在 ± 30 fs 的抖动内不会有明显的功率下降; 而种子激光能量在 $\pm 5\%$ 范围内的抖动则会带来约 4.8% 的峰值功率抖动, 两种抖动对于第一级稳定性的影响都比较小。而在第二级中, 种子激光到达时间的抖动将导致约 6.1% 的 HGHG 输出的峰值功率抖动, 而激光能

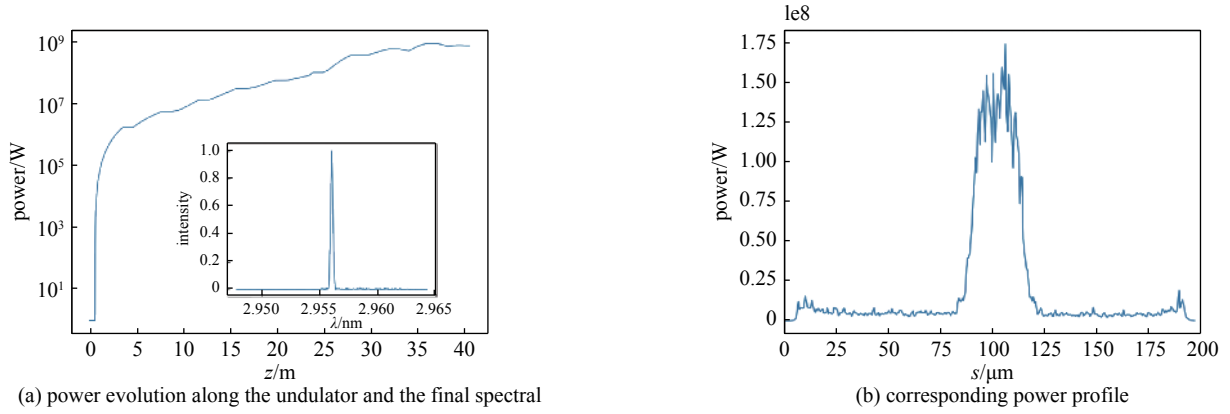


Fig. 6 Single stage EEHG FEL radiation at the exit of undulator

图 6 单级 EEHG 模式波荡器出口的 FEL 辐射

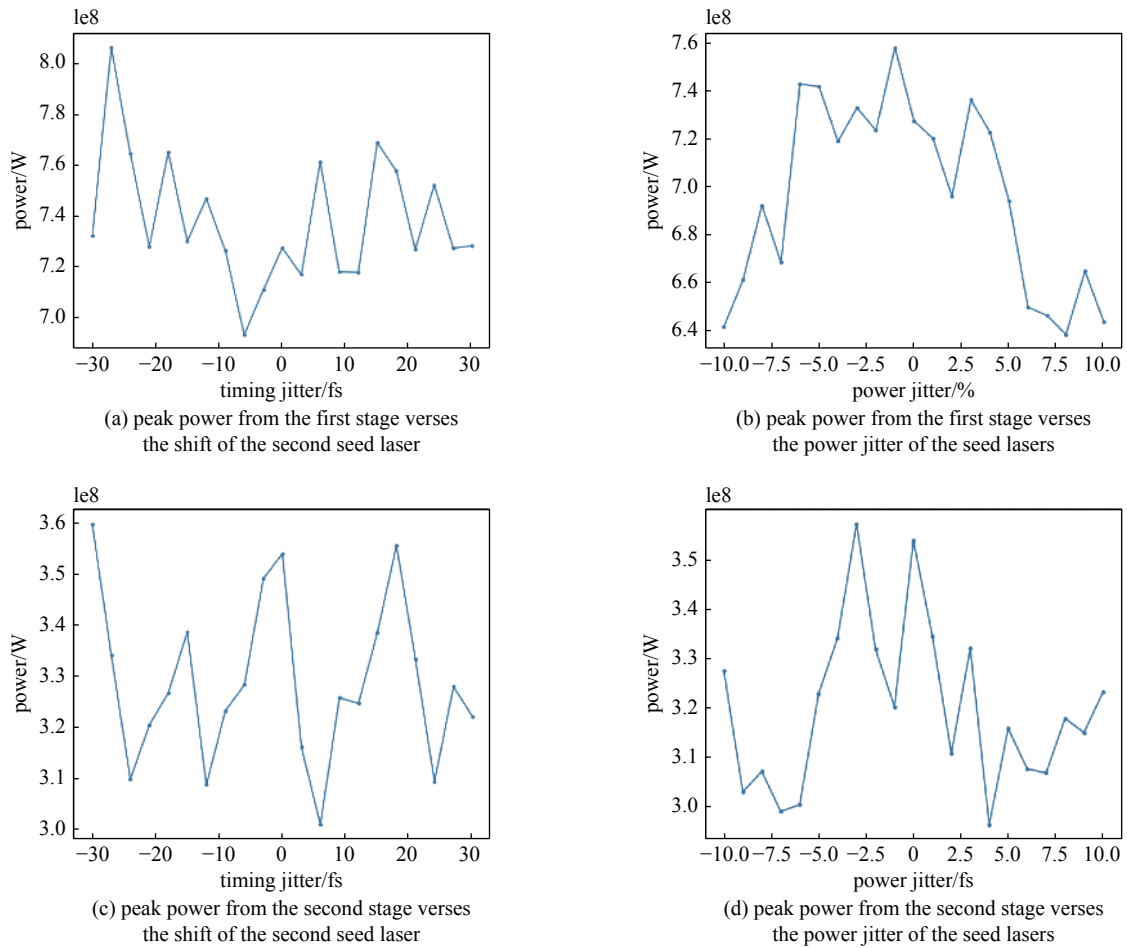


Fig. 7 Timing jitter and power jitter of the seed lasers in the cascade EEHG-HGHG mode

图 7 级联 EEHG-HGHG 模式中两束种子激光的时间与能量抖动对辐射的影响

量的抖动则会带来约 9.1% 的峰值功率抖动。在单级 EEHG 模式中, 种子激光到达时间抖动将造成约 5.8% 的 EEHG 输出的峰值功率抖动, 能量抖动带来的影响约为 13.8%, 如图 8 所示。因此, 单级 EEHG 模式对激光功率的抖动更敏感。

由模拟结果我们可以看出, 两种方案均可实现全相干的水窗波段 FEL 的辐射输出。EEHG-HGHG 级联模式下, 利用束团刷新 (fresh-bunch 技术), 第一级 EEHG 辐射出的 8.8 nm 相干光可作为 HGHG 模式下的调制激光, 与新鲜束团相互作用。HGHG 模式下的第二级只需要辐射 3 次谐波, 此时需要的调制深度较低, 可以得到较高的群聚因子。而单级 EEHG 方案中, 由于谐波转换次数较高, 在电子束品质相同的情况下辐射段入口只有约 3% 的群聚因子, 其辐射功率要低于级联的方案, 此外, 由于单级 EEHG 模式的群聚因子低, 其对于种子激光的抖动也要更为

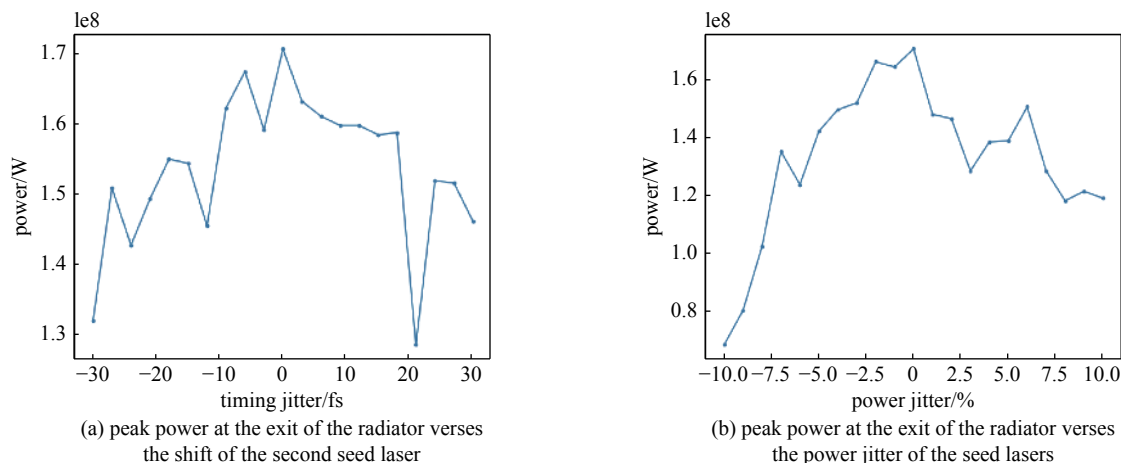


Fig. 8 Timing jitter and power jitter of the seed lasers in the single stage EEHG mode

图 8 单级 EEHG 模式中两束种子激光的时间与能量抖动对辐射的影响

敏感。因此虽然级联 EEHG-HGHG 要比单级 EEHG 的装置复杂,但其输出的 FEL 辐射品质更好。

3 三维效应影响分析

以上的两种方案的模拟均为从头到尾模拟,其中电子束经过 EEHG 两个色散段的过程采用了 ELEGANT,已考虑了相干同步辐射(CSR)效应。在实际实验中,由于 EEHG 的相空间结构精细复杂,容易受到各种三维效应的影响,因此我们还需要仔细分析两种方案的 EEHG 过程中电子束团在经过两个色散段时的非相干辐射(ISR)效应与粒子间相互散射(IBS)效应。色散段中 CSR 效应对电子束纵向相空间的能量调制时间尺度很大,因而对 EEHG 的微群聚影响较小。非相干辐射效应在弯铁中对电子束所引入的能散增长可由式(1)计算^[15]

$$\Delta_E^2 = \frac{55e^2\hbar c}{48\sqrt{3}} \frac{L}{\rho^3} \gamma^7, \quad (1)$$

其中: e 是元电荷电荷量, \hbar 是普朗克常量, c 是光速, L 是电子束经过的长度, ρ 是偏转半径。在我们的两种方案中,其色散段的弯转磁铁均由 4 块二极铁与漂移段组成,二极铁与漂移段的长度分别为 0.5 m 与 0.2 m。在两种方案中,EEHG 的能带结构在经过第二个色散段后,ISR 效应引起的能散增长约为 4 keV,远小于能带结构的间距^[16] $\sim \pi\sigma_E/B_1$, (级联模式约为 241.7 keV,单级 EEHG 模式约为 160.9 keV),其中 σ_E 是电子束的能散, B_1 是第一个色散段的强度。因此,ISR 效应不会对 EEHG 过程中的精细的能带结构产生比较大的影响,但由于单级 EEHG 模式的能带间距较小,相对来说影响会大一些。

同时,我们也研究了电子束内散射(IBS)效应对于 EEHG 的精细结构的影响。根据 G. Penn 的 IBS 模型,电子束在第一个色散段出口到辐射段入口的能散增长为^[17]

$$\langle \Delta\sigma_E \rangle_{\text{IBS}} \approx \left(2\pi^{3/2} \ln \Lambda r_e \frac{I}{I_A} \frac{1}{4\pi\sigma_x^3} \frac{\beta_x}{\gamma} s \right)^{1/2} E_0 \quad (2)$$

其中: r_e 是电子经典半径, σ_x 是电子束团横截面大小, s 是电子束传输的长度, I 是电子束的峰值流强, $I_A = 17$ kA 称为 Alfvén 电流。此过程中的群聚因子衰减可以表示为^[18-19] $b = b_0 e^{-l/L}$,其中 l 为 EEHG 模式下第一个色散段的出口到辐射段入口的距离(在我们的模拟中,两种方案均为 3 m),此过程中 IBS 效应对能带结构的影响最大; $L = 2\sigma_E^2/Dm^2B_2^2$, m 为谐波转换次数, B_2 为第二个色散段的强度, D 是扩散系数,其可以表示为 $D = \langle \Delta\sigma_E \rangle_{\text{IBS}}^2/s$ 。级联模式下第一级 EEHG 中 IBS 效应引起的能散增长约为 5 keV,群聚因子会减少约 0.2%;而单级 EEHG 模式下 IBS 引起的能散增长约为 5 keV,群聚因子会减少约 0.5%。由计算结果可以看出,单级 EEHG 对于三维效应的容忍度要比级联模式低,但三维效应在两种方案中对相干光的辐射产生的影响均较小。

4 结论

上海软 X 射线自由电子激光用户装置是我国第一台可以运行在水窗波段的自由电子激光装置。本文中,我们对 SXFEL-UF 的外种子运行模式的两种方案进行了从头至尾的模拟研究与抖动分析,并对电子束传输过程中的 ISR 与 IBS 效应进行了计算。模拟表明外种子模式可以输出峰值功率超过百 MW,带宽约为傅里叶转换极限 2.1 倍

的水窗波段软 X 射线自由电子激光。

致 谢 感谢王晓凡、黄楠顺、杨涵翔在模拟与软件使用中的讨论。

参考文献:

- [1] Madey J M J. Stimulated emission of bremsstrahlung in a periodic magnetic field[J]. *Journal of Applied Physics*, 1971, 42(5): 1906-1913.
- [2] Emma P, Akre R, Arthur J, et al. First lasing and operation of an ångstrom-wavelength free-electron laser[J]. *Nature Photonics*, 2010, 4(9): 641-647.
- [3] Amann J, Berg W, Blank V, et al. Demonstration of self-seeding in a hard-X-ray free-electron laser[J]. *Nature Photonics*, 2012, 6(10): 693-698.
- [4] Ishikawa T, Aoyagi H, Asaka T, et al. A compact X-ray free-electron laser emitting in the sub-ångström region[J]. *Nature Photonics*, 2012, 6(8): 540-544.
- [5] Shim C H, Yang H, Hong J, et al. Intensity optimization of X-ray free-electron laser by using phase shifters[J]. *Physical Review Accelerators and Beams*, 2020, 23: 90702.
- [6] Allaria E, Castronovo D, Cinquegrana P, et al. Two-stage seeded soft-X-ray free-electron laser[J]. *Nature Photonics*, 2013, 7(11): 913-918.
- [7] Yu L H, Ben-Zvi I. High-gain harmonic generation of soft X-rays with the “fresh bunch” technique[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 1997, 393(1/3): 96-99.
- [8] Milton S V, Gluskin E, Arnold N D, et al. Exponential gain and saturation of a self-amplified spontaneous emission free-electron laser[J]. *Science*, 2001, 292(5524): 2037-2041.
- [9] Feng C, Deng H X. Review of fully coherent free-electron lasers[J]. *Nuclear Science and Techniques*, 2018, 29: 160.
- [10] 周开尚. 超高亮度X射线自由电子激光物理研究[D]. 上海: 中国科学院大学(中国科学院上海应用物理研究所), 2018. (Zhou Kaishang. Physical study of the ultra-high brightness X-ray free electron laser[D]. Shanghai: Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, 2018)
- [11] Xiang D, Stupakov G. Echo-enabled harmonic generation free electron laser[J]. *Physical Review Special Topics—Accelerators and Beams*, 2009, 12: 030702.
- [12] Borland M. ELEGANT: a flexible SDDS-compliant code for accelerator simulation[R]. LS-287: 2000.
- [13] Reiche S. GENESIS 1.3: a fully 3D time-dependent FEL simulation code[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 1999, 429(1/3): 243-248.
- [14] Stupakov G. Using the beam-echo effect for generation of short-wavelength radiation[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102: 074801.
- [15] Xiang D, Stupakov G. Tolerance study for the echo-enabled harmonic generation free electron laser[R]. SLAC-PUB-13644, 2009.
- [16] Hemsing E, Garcia B, Huang Z, et al. Sensitivity of echo enabled harmonic generation to sinusoidal electron beam energy structure[J]. *Physical Review Accelerators and Beams*, 2017, 20: 060702.
- [17] Penn G. Intra-beam scattering for free electron lasers and its modeling in chicanes[EB/OL]. [2014-09]. <https://escholarship.org/uc/item/3jn7g33k>.
- [18] Stupakov G. Effect of coulomb collisions on echo-enabled harmonic generation (EEHG)[C]//Proceedings of FEL 2011. Shanghai: 2011.
- [19] Stupakov G. Effect of coulomb collisions on echo-enabled harmonic generation[C]//Proceedings of FEL 2013. New York: 2013.