



·激光数值仿真·

# 产生超快水窗波段 X 射线的 ESASE 方案模拟\*

涂凌君<sup>1,2</sup>, 冯超<sup>1,3</sup>, 王晓凡<sup>4</sup>, 赵振堂<sup>1,3</sup>

(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; 4. 深圳综合粒子设施研究院, 广东 深圳 518000)

**摘要:** 脉冲宽度在百 as ( $1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$ ) 量级的 X 射线脉冲在超快科学领域有极为重要的作用。相较于目前世界上大部分运行在自发放大辐射模式的 X 射线自由电子激光 (FEL), 增强型自发放大辐射 (ESASE) 模式可以显著增加电子束的峰值流强, 减小 FEL 的增益长度, 可用来产生百 as 量级的超快 X 射线。基于典型的软 X 射线 FEL 参数, 对 ESASE 方案的参数进行了模拟优化, 得到了百 as 量级、功率可达 1 GW 以上、波长可在水窗波段且可调节的 X 射线脉冲, 为后续开展 ESASE 实验及其实验参数的优化提供参考。

**关键词:** 阿秒脉冲; 超快 X 射线; 增强型自发放大辐射; X 射线自由电子激光; 水窗波段

中图分类号: TL99

文献标志码: A

doi: 10.11884/HPLPB202234.210282

## Simulation of generating attosecond water window band pulses by enhanced self-amplified spontaneous emission method

Tu Lingjun<sup>1,2</sup>, Feng Chao<sup>1,3</sup>, Wang Xiaofan<sup>4</sup>, Zhao Zhentang<sup>1,3</sup>

(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;

4. Shenzhen Integrated Particle Facility Research Institute, Shenzhen 518000, China)

**Abstract:** X-ray pulses of a few hundred attosecond play an important role in researches of ultra-fast science. On enhanced self-amplified spontaneous emission (ESASE) mode, peak current of electron beams is much higher and the gain length is much shorter, in comparison with the self-amplified spontaneous emission mode in most running free electron laser (FEL) facilities. Based on typical parameters in soft X-ray free electron laser, this paper conducts an optimized simulation on ESASE. Simulation results show that hundreds attosecond X-ray of tunable wavelength in water window band is obtained, with a peak power of more than 1GW using a typical 2.5 GeV electron beam. This paper provides a reference to our following experiment on ESASE, and also sets a basis to the ongoing optimization of experimental parameters.

**Key words:** attosecond pulse, ultra-fast X-ray, enhanced self-amplified spontaneous emission, X-ray free electron laser, water window band

在分子系统中, 电子运动的时间尺度通常在百 as ( $10^{-18} \text{ s}$ ) 量级<sup>[1]</sup>, as 量级的超快 X 射线脉冲在测量科学、分子结构、多电子动力学等众多领域具有广泛的应用前景<sup>[2]</sup>。水窗波段指的是 X 射线的波长处在 2.34~4.40 nm 之间, 对应光子的能量处在 284~530 eV 之间, 这样的 X 射线可以透过溶液中的水分子而被生物分子中的碳、氮等元素发生反应而在活体纤维等里发挥重要作用<sup>[3]</sup>。脉冲宽度在百 as 量级的水窗波段 X 射线的获得已成为近年激光领域关注的焦点。

最早产生几百 as 量级脉宽激光的方法是高次谐波产生方法 (HHG), 由 M. Hentschel 等人<sup>[4]</sup> 在 2001 年提出。其基本原理是让一束相干的远红外激光驱动气体或原子中的电子来产生驱动激光的高次谐波辐射。HHG 方法在近

\* 收稿日期: 2021-07-13; 修订日期: 2021-08-27

基金项目: 国家自然科学基金项目 (11975300, 11775294, 11905275)

联系方式: 涂凌君, [lingjuntu@foxmail.com](mailto:lingjuntu@foxmail.com)。

通信作者: 冯超, [fengchao@zjlab.org.cn](mailto:fengchao@zjlab.org.cn)。

二十年来已经取得巨大进展:获得的 X 射线能量已经从最早的 75 eV 到 2016 年的 0.5 keV<sup>[3]</sup>;脉冲的宽度从最早的 650 as 缩短到 2009 年的 80 as<sup>[5]</sup>, 2017 年, Gaumnitz 等人获得了 44 as 脉宽的激光<sup>[6]</sup>;同时脉冲能量也从最早的 pJ 量级到最近的  $\mu\text{J}$  量级<sup>[7]</sup>。但上述 HHG 方法得到的 X 射线激光均不能同时满足超快的百 as 量级脉冲宽度、达到软 X 射线波段的较高光子能量以及较高脉冲强度这些条件。

X 射线自由电子激光(XFEL)<sup>[8]</sup>具有高峰值亮度、波长可调、相干性好等诸多优点,其原理和实验方法经过数十年的发展后满足了许多用户的需求而成为新一代光源。目前世界上大部分 X 射线自由电子激光装置运行在自种子型自放大自发辐射(SASE)<sup>[9]</sup>模式。增强型自种子型自放大自发辐射(ESASE)<sup>[10]</sup>模式于 2005 年被 Alexander A. Zholents 提出,这种方法使用一束长波长少周期激光与电子束在扭摆器中进行相互作用,再经过磁压缩器进行密度调制而得到超高的局部流强,这样的电子束在辐射段可以产生脉冲宽度更短的被 FEL,同时其增益长度也短于普通 SASE 模式的 FEL。

ESASE 模式产生的 FEL 对电子束参数、调制激光的参数和波荡器参数非常敏感,采用能量为 10 GeV 的电子束,通过 ESASE 可以得到脉宽小于 100 as、功率在 TW、波长 0.1 nm 的硬 X 射线超快脉冲<sup>[11]</sup>。采用较低能量的电子束,通过 ESASE 也可以获得光子能量 500 eV,功率 50 GW,脉冲半高全宽 383 as 的软 X 射线超快脉冲<sup>[12]</sup>。本文使用一组典型的软 X 射线 FEL 参数开展了 ESASE 模式的模拟研究,模拟研究结果表明采用波长 2.4  $\mu\text{m}$ 、脉宽为 8 fs 少周期红外激光与电子束相互作用,通过 ESASE 过程可以产生百 as 量级、水窗波段的超快辐射脉冲。

### 1 软 X 射线 FEL 的超快 ESASE 方案

图 1 为 ESASE 的基本原理图。电子束能量设定为 2.5 GeV,电子束电流设定为 800 A,其他电子束参数均在典型值范围内可调。电子束先在扭摆器中和一束长波长、少周期的远红外光作用而形成类似图 2(b)的密度调制。这里远红外光波长可在 1500~3000 nm 范围内选取,相应激光器技术已经成熟<sup>[13]</sup>,扭摆器采用单周期波荡器,周期取为 0.5 m。增大调制激光波长可以使图 3(a)中侧峰与主峰距离增大;增大调制激光能量或扭摆器长度可以使调制深度增加;改变色散段强度可以改变电流的形状。形成能量调制的电子束经过一个色散段以形成类似中间电子束能量-纵向位置分布的密度调制,色散段强度的值选取在让电子束峰值流强达到极大值的位置附近<sup>[14]</sup>。已经有密度调制的电子束在辐射段中发光,最终得到的自由电子激光的波长的控制可通过改变辐射段波荡器的  $K$  值和周期长度来调节;同时改变波荡器参数也会影响电子束的增益效果。

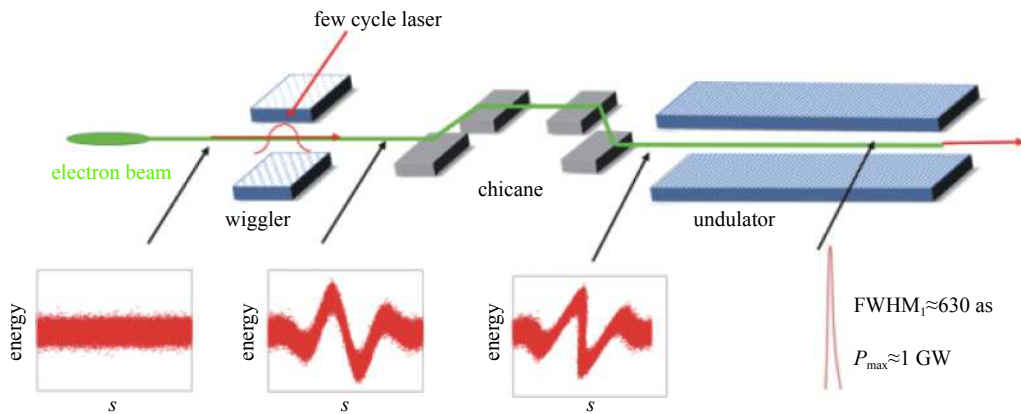


Fig. 1 Scheme of enhanced self-amplified spontaneous emission (ESASE)

图 1 ESASE 示意图

电子束在进行波荡器中产生 FEL 的效率可以用皮尔斯参数  $\rho \approx \frac{1}{4} \left[ \frac{1}{2\pi^2} \frac{I}{I_A} \frac{\lambda_u^2}{\epsilon_x \beta_x} \left( \frac{K}{\gamma} \right)^2 \right]^{1/3}$  进行衡量,其中  $I$  为电子束某个纵向位置的束流强度,  $\lambda_u$  为波荡器周期长度,  $K=0.934B(T)\lambda_u(\text{cm})$ , Alfvén 电流  $I_A=17 \text{ kA}$ ,  $\epsilon_x$  为发射度,  $\beta_x$  为 beta 函数,  $\gamma$  为电子能量。由此公式可以近似估算流强尖峰处产生 FEL 的增益长度  $L_g \sim \lambda_u/4\pi\rho$ 。由于光速度略大于电子束纵向速度,每经过一个波荡器周期,辐射光将超前电子束一个辐射波长,此即为滑移效应。随着电子束沿辐射波段短波荡器前进,滑移距离会逐渐增大,当滑移距离超过电流尖峰宽度,获得的 FEL 脉宽便会增大。在一个合适的长度获得功率尽可能大、脉冲宽度尽可能短的自由电子激光是 ESASE 优化的目标。

## 2 FEL 三维模拟结果

表 1 为模拟所用参数。在模拟过程中, 电子束和少周期远红外光的能量调制过程和色散段的密度调制过程由 FALCON 模拟<sup>[15]</sup>, 输出电子束通过使用 ELEGANT<sup>[16]</sup> 转换格式后输入到 GENESIS1.3<sup>[17]</sup> 中进行辐射过程的模拟。

初始电子束参数如表 1 第一栏所示, 横向位置、横向动量为高斯分布, 且沿水平方向  $x$  和竖直方向  $y$  的均方根值相等。实际电子束束团长度在几十  $\mu\text{m}$  到几百  $\mu\text{m}$ , 与少周期激光作用电子束长度在 10  $\mu\text{m}$  以下, 故此处流强可视在纵向均匀分布。图 2(a) 给出了电子束在 wiggler 中和激光作用进行能量调制后的电子束能量分布, 图 2(b) 为电子束在经过色散段密度调制后的能量分布。

图 3(a) 为电子束在辐射段入口处的流强分布, 图 3(b) 为电子束在此处的能散分布。此处电子束峰流强由 800 A 提升到了 4500 A, 其能散在峰值处附近也显著增大。

图 4(a) 给出了 FEL 功率和脉宽在波荡器中的变化情况。由图实线部分可见长度为 15 m 的波荡器中, FEL 功率增长符合指数增益, 其中较为平缓的两段对应位置为波荡器之间的漂移段。由图虚线部分可见, 电子束刚刚进入波荡器产生的 FEL 脉宽为 500 as, 波荡器长度在 0~11 m 时, 滑移效

表 1 模拟用到的参数

Table 1 Parameters for simulation

initial beam parameters	
average energy/GeV	2.5
average current/A	800
energy spread/%	0.01
RMS of horizontal position/ $\mu\text{m}$	10
RMS of horizontal momentum/( $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ )	$1\times 10^{-6}$
modulative laser parameters	
wavelength/nm	2400
maximum electric field intensity/( $\text{GV}\cdot\text{m}^{-1}$ )	5
FWHM/fs	8
wiggler & chicane parameters	
period/cm	16
period number	1
$K$	39.27
R56/mm	0.75
undulator parameters	
$K$	2.75
period/cm	3
period number	532

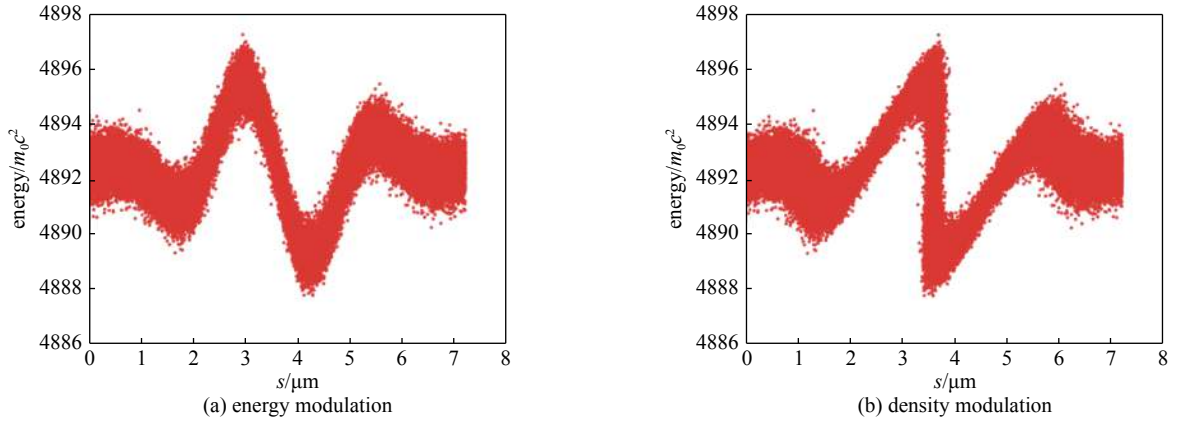


Fig. 2 Energy distribution of electron beam after modulation

图 2 电子束经能量调制与密度调制后的能量分布

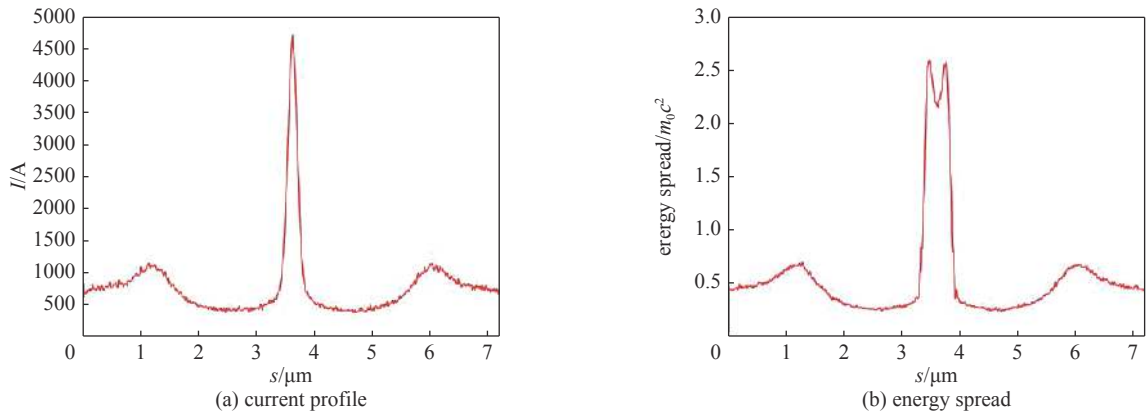


Fig. 3 Current profile and energy spread at 11.3 m undulator

图 3 电子束能量调制与密度调制结果后的流强和能散分布

应尚未对 FEL 脉冲长度产生显著影响, 脉宽始终在 500 as 附近抖动。随波荡器长度增加, 滑移效应的影响开始出现, 在 11~14 m 之间, FEL 脉宽增长很快, 14 m 波荡器后 FEL 脉宽已超过 1 fs。

图 4(b) 给出波荡器 9, 11.3, 13.5, 15 m 的脉冲形状。波荡器 9 m 处 FEL 脉宽约为 800 as, 功率约为 0.2 GW; 波荡器 11.3 m 处 FEL 脉宽 630 as, 峰值功率 1 GW; 波荡器 13.5 m 处 FEL 脉宽 950 as, 峰值功率约为 3.5 GW; 波荡器 15 m 处, FEL 脉冲形状已变为多峰结构, 两侧噪声峰值功率也达到 0.2 GW。

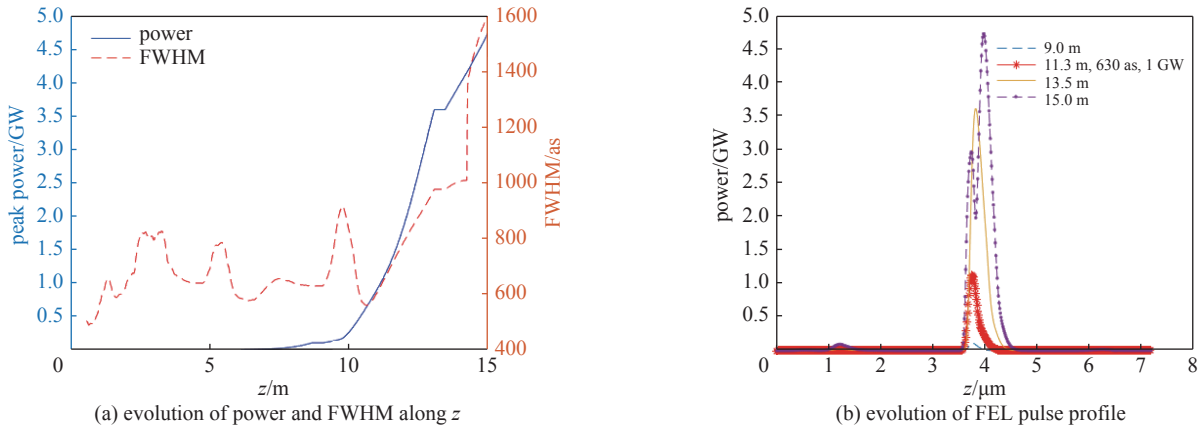


Fig. 4 Gain process in the radiator

图 4 辐射段增益过程

图 5(a) 为 11.3 m 处电子束的能散的纵向分布。与图 3(b) 相比, 电子束靠近头部处的能散明显增大, 表明 FEL 辐射主要发生在此处。图 5(b) 为 11.3 m 处自由电子激光的脉冲形状, 此处峰值功率为 1 GW, 脉冲半高全宽为 630 as。选取波荡器位置在 11.3 m 附近, 即可获得单峰、脉宽在百 as 量级、峰值功率 1 GW 左右的发光波长为 3 nm 的软 X 射线, 且发光波长可通过调整波荡器 K 值实现连续调节。

图 5(b) 为 11.3 m 处自由电子激光的脉冲形状, 模拟结果有明显尖峰出现, 此处峰值功率为 1 GW, 脉冲半高全宽为 630 as。选取波荡器位置在 11.3 m 附近, 即可获得单峰、脉宽在百 as 量级、峰值功率 1 GW 左右的发光波长为 3 nm 的软 X 射线, 发光波长可通过调整波荡器 K 值实现。

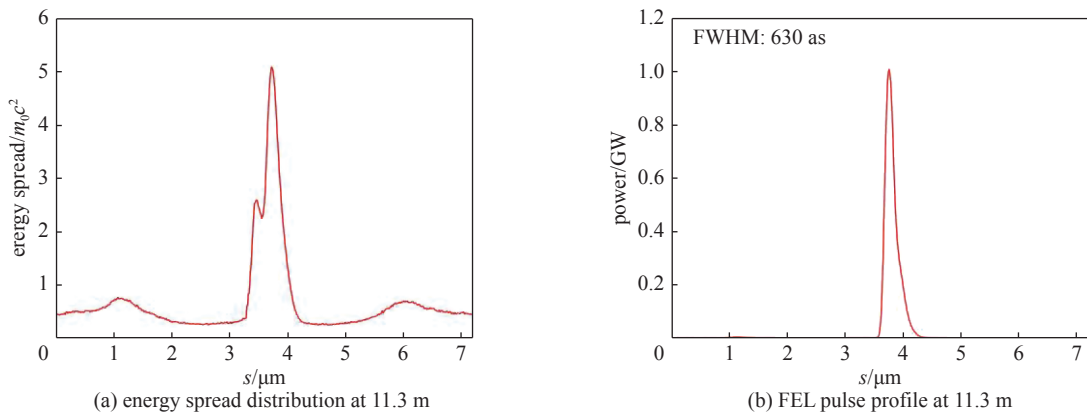


Fig. 5 Energy spread distribution and FEL pulse profile at 11.3 m undulator

图 5 波荡器 11.3 m 处电子束能散和激光形状

### 3 结论

本文主要为一组典型的软 X 射线 FEL 进行了 ESASE 模式的参数设计和优化, 模拟结果显示使用能量为 2.5 GeV 典型电子束参数和波荡器参数可以得到峰值功率 1 GW、脉冲宽度 630 as、波长为 3 nm 的超快软 X 射线。为进一步得到功率更高、脉冲宽度更短、波长可调的方案设计提供了实验和模拟基础。

#### 参考文献:

- [1] Duris J, Li Siqi, Driver T, et al. Tunable isolated attosecond X-ray pulses with gigawatt peak power from a free-electron laser[J]. *Nature Photonics*, 2020, 14(1): 30-36.

- [2] Corkum P B, Krausz F. Attosecond science[J]. *Nature Physics*, 2007, 3(6): 381-387.
- [3] Teichmann S M, Silva F, Cousin S L, et al. 0.5-keV soft X-ray attosecond continua[J]. *Nature Communications*, 2016, 7: 11493.
- [4] Hentschel M, Kienberger R, Spielmann C, et al. Attosecond metrology[J]. *Nature*, 2001, 414(6863): 509-513.
- [5] Goulielmakis E, Schultze M, Hofstetter M, et al. Single-cycle nonlinear optics[J]. *Science*, 2008, 320(5883): 1614-1617.
- [6] Gaumnitz T, Jain A, Pertot Y, et al. Streaking of 43-attosecond soft-X-ray pulses generated by a passively CEP-stable mid-infrared driver[J]. *Optics Express*, 2017, 25(22): 27506-27518.
- [7] Takahashi E J, Lan Pengfei, Mücke O D, et al. Attosecond nonlinear optics using gigawatt-scale isolated attosecond pulses[J]. *Nature Communications*, 2013, 4: 2691.
- [8] Huang Zhirong, Kim K J. Review of X-ray free-electron laser theory[J]. *Physical Review Special Topics—Accelerators and Beams*, 2007, 10: 034801.
- [9] Saldin E L, Schneidmiller E A, Yurkov M V. Statistical properties of radiation from VUV and X-ray free electron laser[J]. *Optics Communications*, 1998, 148(4/6): 383-403.
- [10] Zholents A A. Method of an enhanced self-amplified spontaneous emission for X-ray free electron lasers[J]. *Physical Review Special Topics—Accelerators and Beams*, 2005, 8: 040701.
- [11] Shim C H, Kim D E, Ko I S. Study of ESASE scheme with microbunching instability for generating attosecond-terawatt X-ray pulse in XFELs[C]//Proceedings of the 8th International Particle Accelerator Conference. 2017.
- [12] MacArthur J P, Duris J, Huang Zhirong, et al. High power sub-femtosecond X-ray pulse study for the LCLS[C]//Proceedings of IPAC 2017. 2017.
- [13] Carlson D R, Hutchison P, Hickstein D D, et al. Generating few-cycle pulses with integrated nonlinear photonics[J]. *Optics Express*, 2019, 27(26): 37374-37382.
- [14] Zheng Qi, Chao Feng, Deng Haixiao, et al. Generating attosecond X-ray pulses through an angular dispersion enhanced self-amplified spontaneous emission free electron laser[J]. *Physical Review Accelerators and Beams*, 2018, 21: 120703.
- [15] Zeng Li, Feng Chao, Wang Xiaofan, et al. A super-fast free-electron laser simulation code for online optimization[J]. *Photonics*, 2020, 7(4): 1-12.
- [16] Borland M. ELEGANT: a flexible SDDS-compliant code for accelerator simulation[R]. Advanced Photon Source LS-287. US Department of Energy, 2000.
- [17] 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.