



·激光数值仿真·

回声谐波放大型自由电子激光相干 涡旋 X 射线产生方案*

孙 昊^{1,2}, 冯 超^{1,3}, 刘 波^{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: 外种子型自由电子激光具有全相干、频谱稳定、极高亮度的优点, 可以实现在超小空间和超快时间尺度下对物质结构的研究。具有特殊横向相位模式的光特别是具有螺旋相位的带轨道角动量的涡旋光已经在众多科学领域有了应用, 基于自由电子激光原理产生的辐射横向模式基本上为简单的高斯模式, 为产生具有横向螺旋相位的相干涡旋 X 射线, 对基于回声谐波放大型 (EEHG) 自由电子激光产生涡旋光方案进行了深入研究, 并且根据上海软 X 射线自由电子激光装置 (SXFEL) 的参数, 进行了相关方案设计和模拟研究。三维模拟结果表明, 外种子型 EEHG 自由电子激光可以产生峰值功率可达到 GW 量级的相干涡旋软 X 射线。

关键词: 涡旋光; 外种子型自由电子激光; 软 X 射线; 轨道角动量

中图分类号: TL99

文献标志码: A

doi: 10.11884/HPLPB202234.210285

Coherent X-ray vortex generation based on echo-enabled harmonic generation free electron laser

Sun Hao^{1,2}, Feng Chao^{1,3}, Liu Bo^{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: External seeded free electron lasers (FELs) hold great advantage of emitting extremely high intensity, fully coherent, specially stable light, allowing researchers to study the structure of matter in ultra-small space and ultra-fast time scales. The light with a special transverse phase mode, especially vortex light with orbital angular momentum has been used in many scientific fields. However, the transverse mode of the FELs radiation is basically a simple gaussian mode. In this paper, the generation of the vortex light based on echo-enabled harmonic generation (EEHG) free electron laser is theoretically studied and the simulation studies are carried out according to the parameters of Shanghai Soft X-ray Free Electron Laser Facility (SXFEL). The results of three-dimensional simulation show that the EEHG type free electron laser can produce coherent vortex soft X rays with peak power up to GW magnitude.

Key words: optical vortex, external seeded free electron laser, soft X ray, helical phase

X 射线自由电子激光作为新一代光源^[1], 具有极高亮度、相干性好、波长可调、时间结构优异等特点, 可以作为探究物质原子尺度结构性质强有力的科学工具, 已经在物理、化学、材料、生命科学等诸多领域结构中有非常重要的应用。在大多数现代自由电子激光装置中, 辐射产生过程是基于自放大自发辐射模式 (SASE)^[2]。SASE 起振于电子束团的随机噪声, 它的纵向相干性较差, 中心波长和输出脉冲能量也不稳定。为产生全相干的辐射脉冲, 外种子型自由电子激光特别是回声谐波放大型 (EEHG)^[3] 和高增益高次谐波型^[4] 方案被提出和实验证实^[5-6]。

* 收稿日期: 2021-07-14; 修订日期: 2021-12-08

基金项目: 国家自然科学基金项目 (12122514, 11975300)

联系方式: 孙 昊, sunhao@sinap.ac.cn。

通信作者: 冯 超, fengchao@zjlab.org.cn。

在外种子自由电子激光中,波荡器中产生的辐射脉冲大部分是横向高斯模式。基于自由电子激光产生具有特定横向模式的辐射脉冲特别是具有轨道角动量的涡旋光^[7],已经引起很多加速器物理学家极大的兴趣。在常规激光波长波段,具有横向螺旋相位的涡旋光已经在许多领域有了应用,如微操纵^[8]、冷原子操控^[9]、显微成像^[10]、光束泵浦探测^[11]和光通信^[12],在X射线波段,带轨道角动量的X射线在超快磁学^[13]、衍射成像^[14]、X射线轨道圆二色谱学^[15]以及分子手性^[16]研究等方面有着广泛应用。将X射线自由电子激光的优势与涡旋光的优势结合起来,这将为科学家提供强有力的科学工具,促进实验方法学的发展。

在长波长涡旋光产生方法中,一般常见的是使用传统的光学元件,如螺旋相位板^[17]、柱面镜模式转换器^[18]和计算机产生的全息图^[19],然而这些技术受限于较强的光学元件辐射损伤不能适用于短波长的涡旋光。为产生短波长的涡旋光,一些基于自由电子激光原理的方案被提出,如螺旋波荡器二次谐波辐射^[20],使用具有特殊横向模式种子激光的高增益高次谐波型自由电子激光^[21]和回声谐波型自由电子激光^[22]。这些方案均可以在较短波长范围内产生具有螺旋相位的涡旋光。

本文主要研究了基于回声谐波放大型自由电子激光的涡旋光产生方案,根据上海软X射线自由电子激光装置^[23](SXFEL)的参数进行了方案设计与详细的数值模拟。三维模拟结果表明,EEHG型自由电子激光方案可以产生峰值功率达到GW量级的相干涡旋软X射线,这为后续实验验证奠定了理论基础。为了更清晰地展示该方案的机理,本文引入电子束微群聚分布的分析方法,结果表明,电子束团在种子激光高次谐波上的三维螺旋聚束可以产生相应波长的涡旋光。这也揭示了基于EEHG自由电子激光产生相干涡旋X射线的核心是对电子束相空间进行精细地多维操控以实现电子束团在种子激光高次谐波上的三维螺旋分布。

1 基于EEHG-FEL产生相干涡旋X射线原理

1.1 EEHG方案原理

回声谐波放大型自由电子激光(EEHG-FEL)是一种先进的基于外种子激光的谐波产生方案,它具有较高的谐波转换次数,可以达到X射线波段,它产生的自由电子激光辐射具有优异的时间相干性和空间相干性。EEHG的结构如图1所示,直线加速器产生的电子束团经过第一个调制段波荡器与种子激光进行相互作用后,会产生正弦状的能量调制,经过第一个较强的色散段后,电子束的相空间会被撕裂成能带结构。当电子束经过第二个调制段后,相空间的每一条能带都会重新出现正弦状的能量调制,最后电子束经过一个较弱的色散段后,能量调制会转变为密度调制,电子束会在高次谐波上进行群聚。最后具有精细结构的电子束会在辐射段波荡器中产生种子激光波长上的高次谐波辐射。

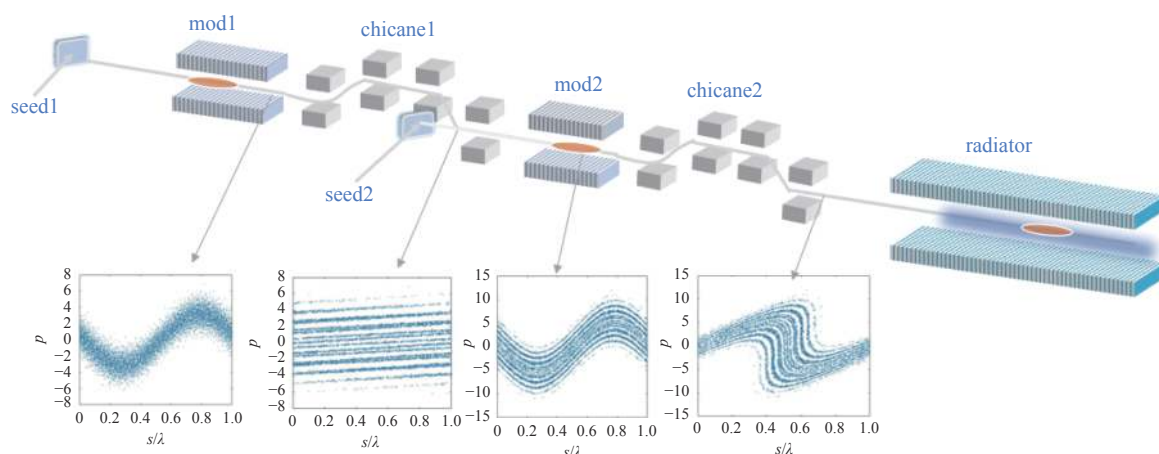


Fig. 1 Scheme of EEHG

图1 EEHG示意图

1.2 EEHG型涡旋光产生方案原理

EEHG型外种子型自由电子激光具有产生短波长、全相干辐射的优势。为了拓展该种结构产生相干涡旋光的功能,提了一种修改型的EEHG方案^[22]。如图2所示,与之前传统EEHG方案不同的是,在两个调制段中至少需要一束涡旋光作为种子激光,能量调制不仅存在于纵向位置上也会在横向空间上有一个螺旋依赖。当这样螺旋能量调制后的电子束团经过如图2所示EEHG束线后,会在第二个色散段出口产生空间螺旋的密度调制。最后,设置

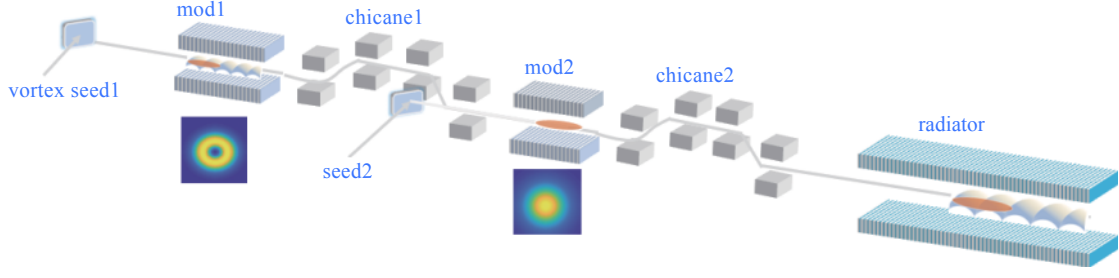


Fig. 2 The vortex generation scheme based on EEHG

图 2 基于 EEHG 的涡旋光产生方案示意图

好辐射波荡器的参数,具有精细螺旋结构的电子束团会在辐射段波荡器中辐射出相应波长的涡旋光。下面从数学形式上对电子束相空间结构的演变进行描述。

直线加速器出口的电子束分布为 $F_i(p, z, r, \phi)$, 其中 r 和 ϕ 代表电子束横向的径向和轴向坐标; z 代表电子束的纵向位置坐标; $p = (E - E_0)/\sigma_E$ 定义为无量纲电子束能量偏差, $E_0 = \gamma mc^2$ 为电子的中心能量, σ_E 为电子束的均方根能散。当电子束通过第一个调制段与一束涡旋光相互作用后, 电子束会产生螺旋的能量调制

$$p_1 = p + \bar{A}_1 \sin(k_1 z + l_1 \phi) \quad (1)$$

式中: z 代表电子束的纵向坐标位置; $k_1 = 2\pi/\lambda_1$ 为第一束种子激光的频率。选择具有一个拓扑荷的涡旋光作为种子激光时, $l_1 = 1$ 为涡旋光的拓扑电荷数, 能量调制可以简写为

$$\bar{A}_1 = A_1 \left(\sqrt{2}r/w_0 \right) \exp\left(-r/w_0\right)^2 \quad (2)$$

式中: $A_1 = \Delta E_1/\sigma_E$, $\Delta E_1 = \sqrt{\frac{P_{\text{mod1}}}{P_0} \frac{m_e 2KL_{u1}}{\gamma w_0}} [J_0(\xi) - J_1(\xi)]$, w_0 为种子激光的束腰尺寸, P_{mod1} 为第一束种子激光峰值功率, $P_0 \approx 8.7 \text{ GW}$, m_e 为电子的质量, K 为无量纲的波荡器参数, L_{u1} 为第一调制段的长度, $J_0(\xi)$, $J_1(\xi)$ 为贝塞尔函数, $\xi = K^2/(4+2K^2)$ 。

上式表示经过第一个调制段波荡器后, 电子束的能量调制不仅与电子束的纵向坐标有联系, 同时也与径向轴向坐标有依赖关系, 在三维坐标系上看, 电子束的能量调制是具有螺旋结构的。当电子束经过第一个色散段结构后, 由于不同能量的电子所走过的路程不同, 电子的纵向位置也会发生变化

$$z_1 = z + B_1 p_1 / k_1 \quad (3)$$

式中: 色散强度 $B_1 = R_{56}^1 k_1 \sigma_E / E_0$, R_{56}^1 为加速器束流光学中束流传输矩阵中的一项值, 通常与束流纵向位置变化有关。经过第一个色散段的电子束会被送往第二个调制段与横向模式为高斯的激光相互作用, 种子激光会再次对电子束团产生能量调制

$$p_2 = p_1 + A_2 \sin(k_2 z_1) \quad (4)$$

式中: $k_2 = 2\pi/\lambda_2$ 为第二束种子激光的频率; A_2 为第二次能量调制的深度, $A_2 = \frac{\Delta E_2}{\sigma_E} = \sqrt{\frac{P_{\text{mod2}}}{P_0} \frac{m_e 2KL_{u2}}{\gamma w_0}} [J_0(\xi) - J_1(\xi)]$, P_{mod2} 为第二束种子激光峰值功率, L_{u2} 为第二调制段的长度。当电子束经过第二个色散段后, 电子束会再次产生密度调制

$$z_2 = z_1 + B_2 p_2 / k_2 \quad (5)$$

式中: $B_2 = R_{56}^2 k_2 \sigma_E / E_0$ 。

经过两个调制段与两个色散段后, 电子束的空间结构会变得非常精细, 最后色散段出口电子的位置坐标会引入第一调制段所引入的横向依赖关系。

2 基于 EEHG-FEL 产生相干涡旋 X 射线模拟研究

基于上海软 X 射线自由电子激光装置 (SXFEL) 的电子束参数如表 1 所示, 本文对 EEHG 型涡旋光产生方法进行模拟研究。根据式(1)、式(2)、式(3)可以编写程序进行电子束相空间操纵。

当电子束经过第一调制段后, 会产生正弦状的能带结构如图 3(a) 所示, 与之前 EEHG 不同的是, 该相空间结构的横坐标不仅包含电子束的纵向信息, 也包含一个横向的螺旋方位角, 所以横坐标是在 4π 上进行展开。具有螺旋

表 1 模拟参数

Table 1 Parameters for simulation

energy/GeV	peak current/A	energy spread/keV	laser wavelength/nm	laser power_1/MW	laser power_2/MW
1.6	1500	160	266	200	200
modulator length_1/m	modulator length_2/m	R56_1/m	R56_2/m	FEL wavelength/nm	radiator period/m
1	1	0.0034	0.000093	7	0.055

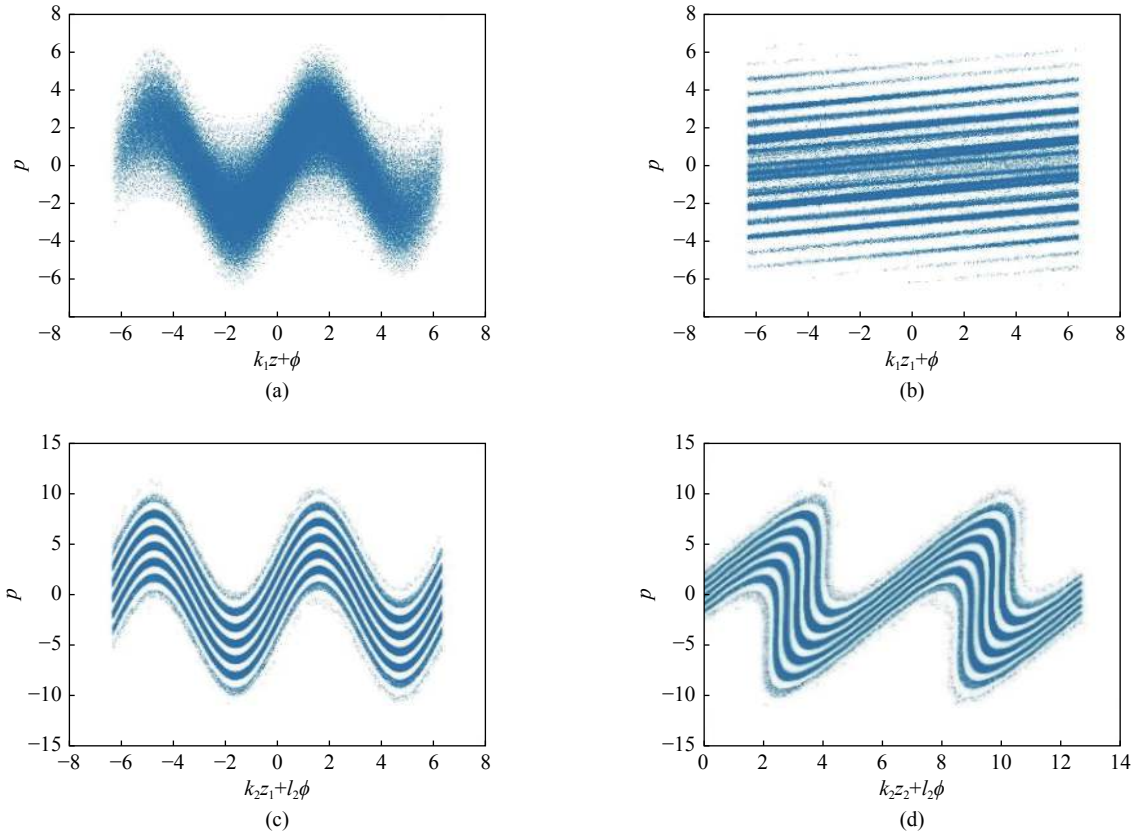


Fig. 3 The evolution of the electron beam phase space

图 3 电子束相空间结构变化

能量调制的电子束依次经过第一色散段、第二调制段、第二色散段后,电子束相空间如图 3(b)~图 3(d)所示。在第二色散段出口,电子束的相空间重新出现密度调制,在种子激光高次谐波上发生了群聚。因为在第一调制段涡旋型种子激光给电子束团所加载的能量调制是螺旋形的,在第二色散段出口,电子束团的密度调制也会具有螺旋特性。为了更清晰地观察电子束的螺旋密度调制,引入螺旋群聚因子^[22]来对束团的群聚进行定量描述

$$b^l(h) = \left| \left\langle e^{-ihz_2 - il\phi} F_f(p_2, z_2, r, \phi) \right\rangle \right| \quad (6)$$

式中: h 为种子激光的高次谐波数; l 为涡旋光的拓扑电荷数,它的正负代表不同的螺旋方向; $F_f(p_2, z_2, r, \phi)$ 代表第二色散段出口处的电子束分布函数。

可以根据式(6)对种子激光高次谐波上的螺旋群聚因子进行计算,选择种子激光的第 38 次谐波 $h = 38$, $l = -1$,将第二色散段出口处的电子束分布导入到式(6)中,最后可以得到如图 4 所示的整个电子束螺旋群聚因子的分布。从图 4 可以看出,电子束在种子激光 38 次谐波上具有最大可达到 8.5% 的螺旋群聚因子,具有较强的螺旋密度调制。

将上述具有较强的螺旋群聚因子的电子束团送至辐射段波荡器进行辐射模拟。该模拟的过程是在自由电子激光

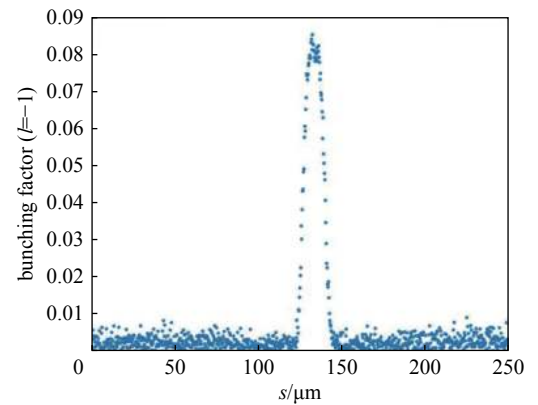


Fig. 4 Helical bunching distribution along the electron beam at the exit of the second dispersion section

图 4 第二色散段出口处电子束团的螺旋群聚因子分布

领域常用的模拟软件 Genesis 1.3^[24] 中完成的。将辐射段波荡器的参数调节到共振于种子激光的 38 次谐波上, 设计好辐射段的 Lattice 参数, 然后进行辐射段模拟。如图 5(a) 所示, 经过 20 m 的辐射段波荡器后, 电子束可以产生波长为 7 nm, 脉冲峰值功率可达到 1 GW 的相干软 X 射线。由图 5(a) 可以看出, 在辐射段入口处, FEL 辐射横向光斑模式近似环状模式, 经过整个辐射段以后, 辐射的横向光斑模式为非常纯净的环状光斑模式。图 5(b) 展示的是在辐射段出口处, FEL 辐射的横向相位是典型的涡旋相位分布, 可以看出该相干涡旋 X 射线具有一个拓扑荷。

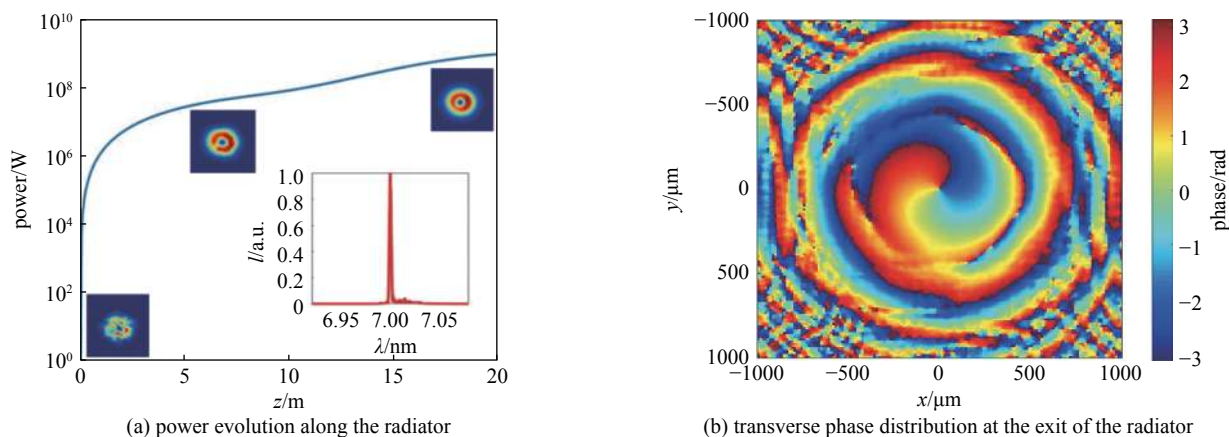


Fig. 5 The evolution of the FEL radiation in radiator

图 5 波荡器中 FEL 辐射变化

在辐射段波荡器中的前期辐射过程中会存在辐射光的横向模式竞争, 如果涡旋光模式占据主导, 则该模式就会得到有效放大; 反之横向高斯模式占据主导, 最后得到有效放大的就不是涡旋光模式。可以根据前面提到的电子束的螺旋群聚分布对辐射光横向模式进行间接分析, 沿 20 m 的辐射段波荡器, 本文做出了 $l = -1$ (蓝色曲线) 与 $l = 0$ (橙色曲线) 的群聚因子变化曲线, 如图 6 所示。由图 6 可以看出, 在辐射段波荡器入口处, 螺旋群聚因子为 8.5%, 远远高于 $l = 0$ 的群聚因子。因此, 在辐射段入口, 具有一个拓扑荷的涡旋辐射光占据了主导, 在辐射段的前 5 m, 涡旋光模式压制了其他横向模式的光, 在辐射段的后 15 m, 较强的涡旋光可以有效放大直至饱和, 这对应了图 5 所示的纯净涡旋光模式。

电子束的微群聚结构对应辐射光的模式, EEHG-FEL 产生涡旋光的方法核心在于产生螺旋分布的电子束, 从电子束微群聚分布上可以间接对于辐射光的模式进行分析。在此引入横向群聚因子^[21]

$$b(\mathbf{r}) = \langle \exp[i\theta_i(\mathbf{r})] \rangle \quad (7)$$

式中: \mathbf{r} 代表电子的径向矢量; $\theta_i(\mathbf{r})$ 代表第 i 个电子的质动力势相位。

将辐射段入口和辐射段出口的电子束分布代入式(7)进行计算, 可以得到如图 7 所示的微聚束横向相位分布。图 7(a) 为在辐射段波荡器入口的电子束团在种子激光 38 次谐波波长上的微聚束横向相位分布, 可以看到微聚束在横向上具有准螺旋分布; 从图 7(b) 可以看出, 在辐射段波荡器出口, 电子束的微群聚分布已经呈现出明显的螺旋形结构。这也验证了 EEHG-FEL 产生涡旋光的机理, 螺旋结构的微聚束电子束团产生螺旋结构的辐射光。

3 结 论

相干涡旋软 X 射线作为新型实验工具, 在物理化学、材料科学领域有着重要应用。本文研究了基于 EEHG 外种子自由电子激光的相干涡旋 X 射线的产生方法, 首先研究了理论模型, 特别是深入研究了电子束团相空间的精细操控。然后根据上海软 X 射线自由电子激光参数进行了详细的方案设计和数值模拟, 分析了辐射光的横向和纵向性质。三维数值模拟表明基于该种方案可以产生峰值功率达到 GW 量级的相干涡旋软 X 射线。为了更清晰

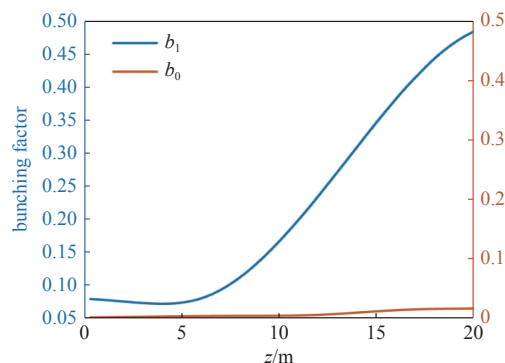


Fig. 6 The evolution of the bunching factor along the radiator

图 6 沿辐射段波荡器的群聚因子变化曲线

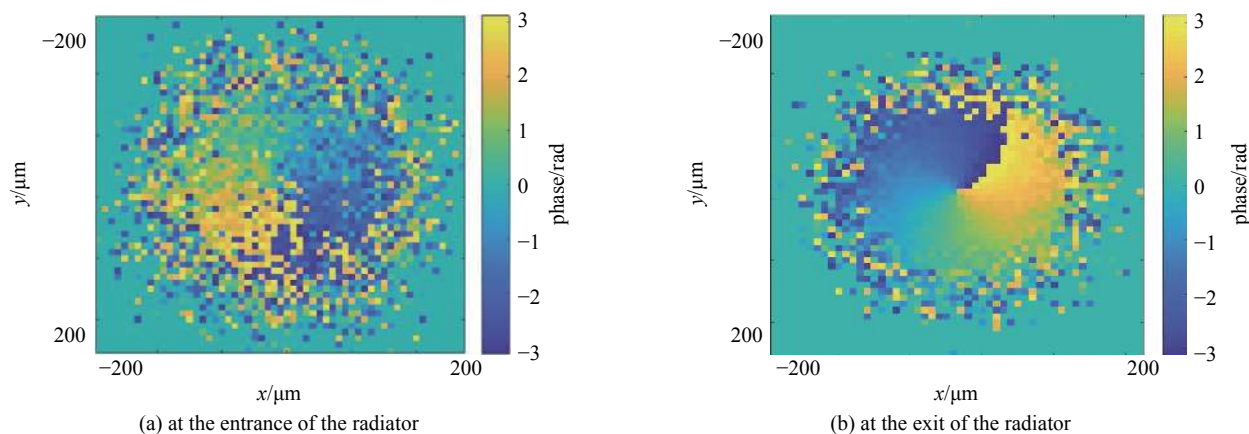


Fig. 7 The transverse phase distribution of the microbunching

图7 微聚束横向分布相位

地展示该方案的机理,从电子束微群聚的横向分布进行了分析,结果表明电子束团在种子激光高次谐波上的三维螺旋聚束可以产生相应波长的涡旋光。这也揭示了基于EEHG自由电子激光产生涡旋光方法的核心是对电子束相空间进行精细操控以实现种子激光高次谐波上的三维螺旋分布。基于该方案的理论分析与数值模拟为以后的实验设计及验证奠定了基础,也为拓展X射线自由电子激光装置能力提供了帮助。需要指出的是,本文仅完成了对该方案的物理设计与数值模拟,对于一些更具体的影响因素没有进行分析,例如影响第一束涡旋种子激光与电子束调制的可能影响因素以及电子束经过色散段时所产生的相干同步辐射效应(CSR)对电子精细相空间结构的影响等,未来将继续深入研究不同物理效应对于该方案的影响,以进一步地完成更为具体的方案设计。

参考文献:

- [1] Huang Zhirong, Kim K J. Review of X-ray free-electron laser theory[J]. *Physical Review Accelerators and Beams*, 2007, 10: 034801.
- [2] 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.
- [3] Stupakov G. Using the beam-echo effect for generation of short-wavelength radiation[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102: 074801.
- [4] Yu L H. Generation of intense uv radiation by subharmonically seeded single-pass free-electron lasers[J]. *Physical Review A*, 1991, 44(8): 5178-5193.
- [5] Feng Chao, Deng Haixiao, Zhang Meng, et al. Coherent extreme ultraviolet free-electron laser with echo-enabled harmonic generation[J]. *Physical Review Accelerators and Beams*, 2019, 22(5): 050703.
- [6] Ribič P R, Abrami A, Badano L, et al. Coherent soft X-ray pulses from an echo-enabled harmonic generation free-electron laser[J]. *Nature Photonics*, 2019, 13(8): 555-561.
- [7] Allen L, Beijersbergen M W, Spreeuw R J C, et al. Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes[J]. *Physical Review A*, 1992, 45(11): 8185-8189.
- [8] Franke - Arnold S, Allen L, Padgett M. Advances in optical angular momentum[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2008, 2(4): 299-313.
- [9] Kuga T, Torii Y, Shiokawa N, et al. Novel optical trap of atoms with a doughnut beam[J]. *Physical Review Letters*, 1997, 78(25): 4713-4716.
- [10] Jack B, Leach J, Romero J, et al. Holographic ghost imaging and the violation of a Bell inequality[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 103: 083602.
- [11] Shigematsu K, Yamane K, Morita R, et al. Coherent dynamics of exciton orbital angular momentum transferred by optical vortex pulses[J]. *Physical Review B*, 2016, 93: 045205.
- [12] Liu Baiyang, Cui Yuehui, Li Ronglin. A broadband dual-polarized dual-OAM-mode antenna array for OAM communication[J]. *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 2014, 16: 744-747.
- [13] van Veenendaal M. Interaction between X-ray and magnetic vortices[J]. *Physical Review B*, 2015, 92: 245116.
- [14] Jüstel D, Friesecke G, James R D. Bragg-von Laue diffraction generalized to twisted X-rays[J]. *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances*, 2016, 72(2): 190-196.
- [15] van Veenendaal M, McNulty I. Prediction of strong dichroism induced by X rays carrying orbital momentum[J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98: 157401.
- [16] Ye L, Rouxel J R, Asban S, et al. Probing molecular chirality by orbital-angular-momentum-carrying X-ray pulses[J]. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2019, 15(7): 4180-4186.
- [17] Kotlyar V V, Almazov A A, Khonina S N, et al. Generation of phase singularity through diffracting a plane or Gaussian beam by a spiral phase plate[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2005, 22(5): 849-861.
- [18] Beijersbergen M W, Allen L, Van der Veen H E L O, et al. Astigmatic laser mode converters and transfer of orbital angular momentum[J]. *Optics Communications*, 1993, 96(1/3): 123-132.

- [19] Terhalle B, Langner A, Päiväranta B, et al. Generation of extreme ultraviolet vortex beams using computer generated holograms[J]. [Optics Letters](#), 2011, 36(21): 4143-4145.
- [20] Sasaki S, McNulty I, Dejus R. Undulator radiation carrying spin and orbital angular momentum[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2007, 582(1): 43-46.
- [21] Ribič P R, Gauthier D, De Ninno G. Generation of coherent extreme-ultraviolet radiation carrying orbital angular momentum[J]. [Physical Review Letters](#), 2014, 112: 203602.
- [22] Hemsing E, Marinelli A. Echo-enabled X-ray vortex generation[J]. [Physical Review Letters](#), 2012, 109: 224801.
- [23] Zhao Zhentang, Wang Dong, Gu Qiang, et al. Status of the SXFEL facility[J]. [Applied Sciences](#), 2017, 7: 607.
- [24] 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.