

アト秒・zepto秒 X線パルス発生のための共振器型赤外FELの 3次元シミュレーション

INFRARED FEL OSCILLATOR 3D SIMULATION FOR AN ATTO- AND ZEPTO-SECOND X-RAY GENERATION

永井 良治^{*A)}、羽島 良一^{A)}
Ryoji Nagai^{*A)}, Ryoichi Hajima^{A)}

^{A)}National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology (QST)

Abstract

We have proposed an atto- and zepto-second x-ray source by combination of a few-cycles infrared intense pulse owing to a free-electron laser (FEL) oscillator and a high harmonic generation owing to a gas target illumination by an intense laser pulse. A three-dimensional simulation of the FEL oscillator is under progress to estimate influence of the diffraction. We report here on the state of the three-dimensional simulation.

1. はじめに

我々は、共振器型自由電子レーザー (FEL) の完全同期発振で得られる数サイクルの中赤外高強度レーザーパルス [1] と超短パルスレーザーをガス中に集光することによる高次高調波発生 (High Harmonics Generation; HHG) [2] の組み合わせによるアト秒・zepto秒パルス X線源を提案している [3]。このパルス X線源を実現するためには、パルス当たりのエネルギー、1mJ 級、パルス長、数サイクルの中赤外レーザーが必要であるが、既存の光パラメトリック増幅器 (OPA) などを用いた手法では、このようなレーザー光の発生は困難である。そこで、共振器型 FEL の完全同期発振によって得られる中赤外高強度レーザーパルスを利用した高次高調波発生によるアト秒・zepto秒パルス X線源を提案している。必要とされる中赤外高強度レーザーパルスが完全同期発振により得られることは、1次元シミュレーションにより示されている [3]。ここでは、1次元シミュレーションでは得られない回折の影響 (出力孔からの出力効率)、FEL 発振後の電子ビームのエミッタンスなどを明確にすることを目的として進めている 3次元シミュレーションの経過について報告する。

2. 3次元シミュレーションの概要

共振器型 FEL の 3次元シミュレーションを行うには、アンジュレータ中での電子と光の相互作用のシミュレーションと光共振器での光の伝搬のシミュレーションが必要であるが、これらが、一体となったシミュレーション・コードは公開されていない。そこで、アンジュレータ中での相互作用のシミュレーションには FEL の 3次元シミュレーション・コード GENESIS [4] を利用し、Fig. 1 に示すように GENESIS に光共振器での光の伝搬のシミュレーションを付加することで、共振器型 FEL の 3次元シミュレーションを構成した。ショットノイズからの発振を模擬するために、光の振幅の初期値はゼロとし、2回目以降のパスでは、GENESIS から出力された光の複素振幅を光共振器内を伝搬さ

せ、アンジュレータに再入射することで、共振器型 FEL の 3次元シミュレーションを行った。光共振器内の光の伝搬については、光共振器の損失と取り出し効率の評価を行った際 [5] と同様の手法で、FFT の畳み込み積分を用いたキルヒホッフ積分により行った。GENESIS では時間軸方向にスライスされた光の複素振幅が計算されるので、各スライス毎にキルヒホッフ積分を用いて光共振器内を伝搬させた。

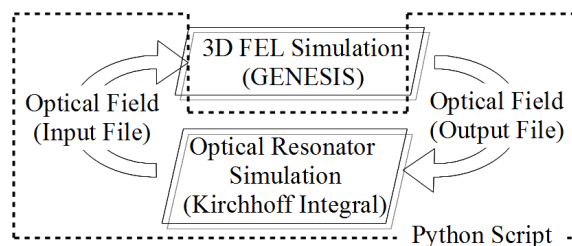


Figure 1: Summary of the FEL oscillator 3D simulation.

Fig. 2 に示すように、光を伝搬する際に考慮したアパチャはアンジュレータ・ダクトの出入口とミラーであり、出力ミラーではセンターホールによって光が共振器外へ取り出される構成とした。アンジュレータとそのダクトは光共振器の中央に配置される対称な構成とし、光共振器の長さは、電子ビームの繰り返し周波数 f_B から $L_R = c/(2f_B)$ とした。ミラーの曲率半径 R については、アンジュレータダクトでの回折損失を最小とするために、ダクトの半分の長さ $L_D/2$ がレイリー長 z_R となるように選ぶと、ダクト長と共振器から

$$R = \frac{L_D^2 + L_R^2}{2L_R} \quad (1)$$

として求められる。GENESIS ではアンジュレータ・ダクトの入口から出口までの計算を行った。両端のアンジュレータ磁場のないアンジュレータ・ダクト部分についてはアンジュレータ強度をゼロとして計算を行った。

GENESIS に追加した共振器内の光の伝搬とシミュレーション全体の制御については汎用性を考慮して

*nagai.ryoji@qst.go.jp

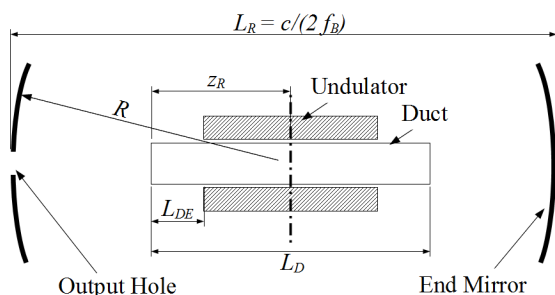


Figure 2: Schematic drawing of the optical resonator.

Python で記述した。Python のバージョンは 3.4 で、使用した主なモジュールは numpy と mpi4py である。numpy は光の伝搬の計算に使用している FFT などが含まれる数値計算用モジュールであり、mpi4py は計算の高速化のための MPI による並列化のためのモジュールである。シミュレーション全体を制御する script で GENESIS の入力ファイルと複素振幅のファイル操作を行い、GENESIS と光の伝搬を行う計算を交互に subprocess として起動することでシミュレーションを行った。各パス毎に別のプロセスとして、GENESIS を起動しているため、各パス毎に乱数の種を変えないと毎回同じ乱数となってしまう、ショットノイズの効果が正しく反映されない。そこで、入力ファイル中の乱数の種についての値を時刻から作り、各パス毎に変えている。また、共振器長のデチューンについては、各スライス毎の複素振幅をシフトすることで再現した。デチューンがスライスの整数倍でない場合は、スライスとスライスの内挿により複素振幅を求めた。

Table 1: Typically 3D Simulation Parameters for the HHG X-Ray Source

electron beam	
energy	~38 or ~100 MeV
energy spread	0.5 %
bunch length	240 fs, rms
bunch charge	240 pC
peak current	400 A
nor. emittance	2 mm-mrad, rms
undulator	
pitch	7 cm
number of periods	20
strength, a_W	1 or 3.5
FEL and optical resonator	
wavelength	12 μm
rep. rate	10 MHz
undulator duct apertures	20 \times 50 mm
end mirror radii	40 mm
output hole radius	0.6 mm
resonator detune length	-12 or 0 μm

3. 3次元シミュレーションの結果と検証

3.1 3次元シミュレーションの結果

アト秒・zepto秒パルス X 線源のために必要とされる中赤外高強度レーザーパルスが完全同期発振により得られることが 1 次元シミュレーションにより示され、装置の設計例としてのパラメータも示されている [3]。ここでは、計算時間の制限などから Table 1 に示すパラメータでの 3 次元シミュレーションを行った。ただし、入射する電子ビームのエネルギーは FEL の共鳴エネルギーとし、入射ビームのエンベロープについては、Fig. 3 に示すように、x 方向は光共振器のレイリー長とマッチさせ、y 方向については、アンジュレータの収束力とマッチングする条件とした。

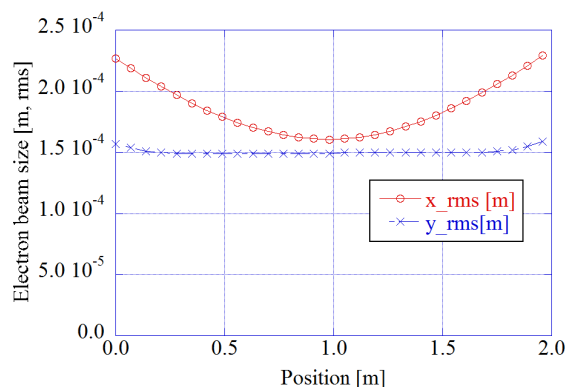


Figure 3: Electron beam size in the GENESIS simulation.

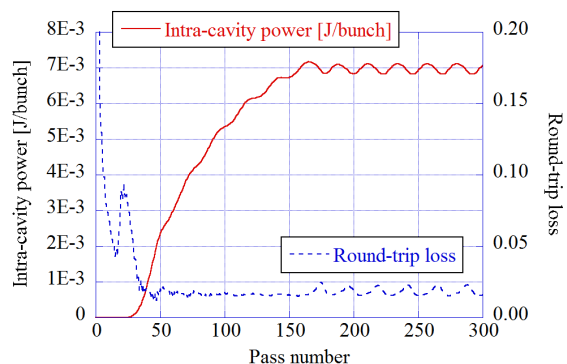


Figure 4: Intra-cavity power and round-trip loss in case of the resonator detune length of -12 μm .

まず、共振器長のデチューン、-12 μm 、アンジュレータ強度、 $a_W = 1$ の場合の計算結果を示す。Fig. 4 に示すように、150 パス程度で、光共振器内の蓄積エネルギーが飽和している。Fig. 5 に、電子ビームの電流分布と、アンジュレータ出口での光の時間プロファイルを示す。負のデチューンにより、電子ビームより前に次々に光パルスが押し出され、パルス列を形成している様子が分かる。Fig. 4 において、150 パス以降の光共振器内の蓄積エネルギーが振動しているが、これは、シミュレーションで用いた時間の窓の大きさが不十分であったために、前に押し出されたパルス

列の最後の部分が切れているためであると思われる。共振器長デチューンを持つ FEL 発振器の計算の際には、時間の窓のサイズに十分注意する必要がある。

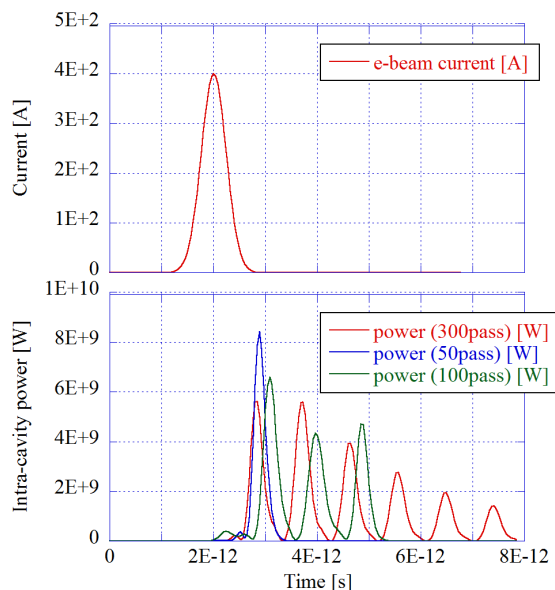


Figure 5: Intra-cavity power time profile in case of the resonator detune length of $-12 \mu\text{m}$.

次に、共振器長のデチューン、ゼロ（完全同期）、アンジュレータ強度、 $a_W = 3.5$ の場合の計算結果を示す。Fig. 6 に示すように、3000 パスでも飽和に至らず、光共振器の損失がパス毎に振動している。Fig. 7 に光共振器からの出力を示す、これも、損失と同様にパス毎に大きく振動している。これらの、3000 パスでも飽和していない、光共振器の損失、出力が振動している原因は、空間プロファイルがパス毎に変化し、一定のモードに収束していないことであると思われる。Fig. 8 に、取り出し側のミラーでの光パワーの空間プロファイルを示す。ただし、このプロファイルは時間軸方向を積分したものである。

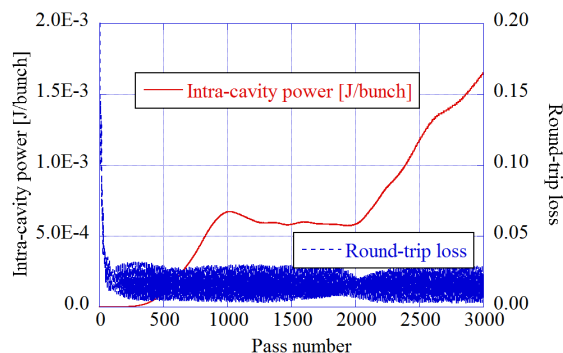


Figure 6: Intra-cavity power and round-trip loss in case of the resonator detune length of zero.

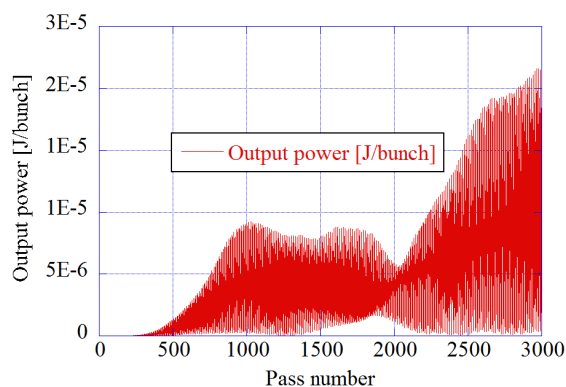


Figure 7: Output power in case of the resonator detune length of zero.

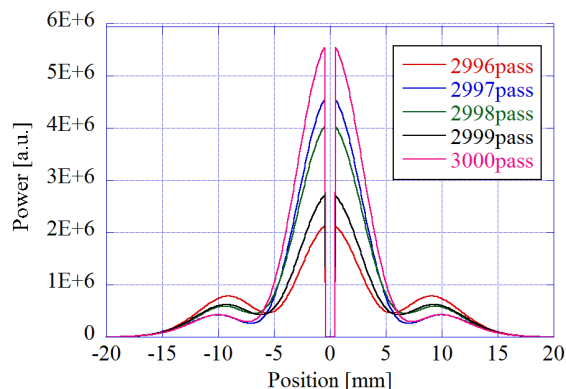


Figure 8: Transverse profile at the output mirror in case of the resonator detune length of zero.

3.2 3次元シミュレーションの検証

共振器型 FEL の 3次元シミュレーション・コードの検証を行うために、JAERI ERL-FEL [6] での実験結果との比較を試みた。実験結果では、完全同期発振時の立ち上がり時間、約 $30 \mu\text{s}$ (600 パスに相当)、出力、 0.75 kW ($36 \mu\text{J}$ に相当) であった。JAERI ERL-FEL の主なパラメータを Table 2 に示す。

Fig. 9 に光共振器内の蓄積エネルギーと共振器の損失の変化を示す。計算は 300 パスで打ち切ったが、発振する様子が全く伺えなかった。シミュレーションにおいて JAERI ERL-FEL での実験を再現できなかった理由については、現在、検討中であるが、その一つとして、ショットノイズで模擬される自発放射光の各スライスのプロファイルが滑らかでないことが考えられる。Fig. 10 に、JAERI ERL-FEL (JAERI Case) と前節で示したパラメータ (HHG-Case) での 1 回目の GENESIS の計算で得られる光強度が最大のスライスの空間プロファイルを示す。HHG-Case ので空間プロファイルは中央部に比較的かたまった形状となっているのに対して、JAERI-Case での空間プロファイルは塊をなしていない。完全同期発振はショットノイズの影響を大きく受けるので、ショットノイズにより再現している自発放射光の空間プロファイルが JAERI-Case で発振しない、HHG-Case で立ち上がりに

Table 2: FEL Operation Parameters for the JAERI ERL-FEL

electron beam	
energy	~17 MeV
energy spread	1.5 %
bunch length	5.1 ps, rms
bunch charge	0.4 nC
peak current	35 A
nor. emittance	40 mm-mrad, rms
undulator	
pitch	3.3 cm
number of periods	50
strength, a_W	0.7
FEL and optical resonator	
wavelength	21.3 μm
rep. rate	20.8250 MHz
undulator duct apertures	15 \times 56 mm
end mirror radii	60 mm
output hole radius	0.8 mm

時間がかかるなど共振器型 FEL を十分に模擬できない理由の 1 つではないかと考えている。

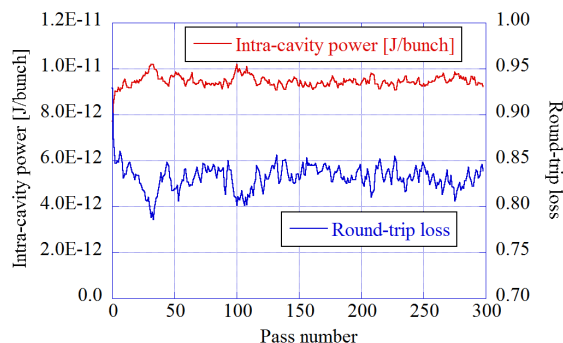


Figure 9: Intra-cavity power and round-trip loss in case of JAERI ERL-FEL parameters.

4. まとめ

高次高調波発生によるアト秒・zepto秒パルス X 線源に用いる中赤外共振器型 FEL で光共振器における回折の影響を評価するために、共振器型 FEL の 3 次元シミュレーションを行った。本シミュレーションは、既存の 3 次元 FEL シミュレーション・コード GENESIS に光共振器を模擬するプログラムを付加することで、共振器型 FEL を模擬している。アト秒・zepto秒パルス X 線源に用いるパラメータなどでのシミュレーションでは、発振の様子をある程度模擬できた。しかし、本コードの検証のために JAERI ERL-FEL のパラメータを用い実験結果との比較を試みたが、このパラメータでは FEL 発振を模擬できなかった。主

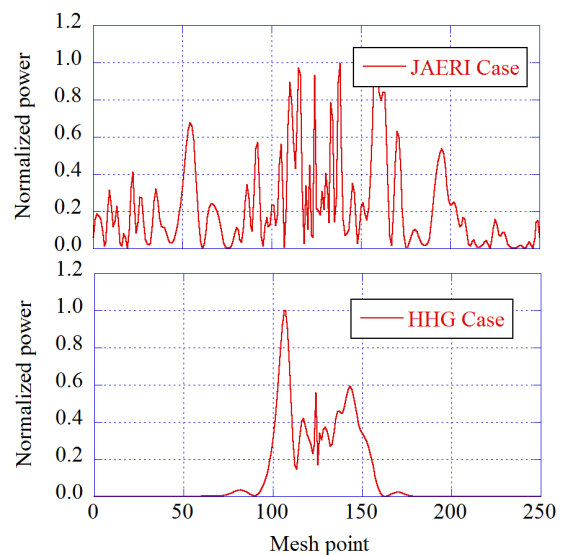


Figure 10: Transverse profile at the peak slice.

な理由は GENESIS から出力される自発放射光の分布が滑らかでなく、回折損失が過大に大きくなってしまふことではないかと思われるが、発振を模擬できていない理由や問題の解決方法については、現在、検討を進めている。

また、GENESIS では SVEA と呼ばれる近似やスライス毎に分けた計算手法を用いており、光共振器の部分についてもキルヒホッフ積分を用いているので、完全同期発振で得られる数サイクルのパルス光での物理現象を十分に表現できているかの疑問もある。これらの超短パルスの効果の模擬についても、今後検討を進める予定である。

本シミュレーションを行うにあたり、GENESIS の使用方法などについてご教授頂いた KEK の加藤龍好教授に感謝の意を表す。

参考文献

- [1] R. Hajima and R. Nagai, Phys. Rev. Lett. 91, 024801 (2003).
- [2] T. Popmintchev *et al.*, Science 336, 1287 (2012).
- [3] R. Hajima and R. Nagai, “Generation of atto- and zepto-second X-ray pulses from infrared FEL oscillators”, in these proceedings, MOP071.
- [4] S. Reiche, Nucl. Instr. & Meth. A 429, 243–248 (1999); <http://genesis.web.psi.ch/index.html>
- [5] R. Nagai *et al.*, Nucl. Instr. & Meth. A 528, 231–234 (2004).
- [6] N. Nishimori *et al.*, Proc. of FEL2006, 265–272 (2006).