

量子 FEL の数値計算モデル

NUMERICAL MODELS ON QUANTUM FELS

尾崎俊幸[#]

Toshiyuki Ozaki[#]

Carpio AI

Abstract

Beginning with Madey's pioneering work, there have been many papers on quantum-mechanical treatments of free electron laser (FEL). After the Lorentz transformation is performed from laboratory frame to Bambini-Renieri frame, the motion of electrons can be treated non-relativistic. The low-gain FELs is discussed for numerical solution. In the latter section, the quantum regime of high gain FEL is also presented for numerical solution.

1. はじめに

自由電子レーザー(FEL)は1971年に、M.J. Madey が提案した。ここでは量子力学で議論している。その後の約10年も、量子力学で多くの論文が提出された。文献[1]の Madey の論文によるゲインの計算式の分母と分子にあるプランク定数 h が上下でキャンセルし、古典力学で記述できる事が判明し、加速器による開発が急激に進展した。他方、量子 FEL は、理論研究のみが進んだ。

古典力学領域と量子力学領域の境は、量子 FEL パラメーター $\bar{\rho}$ によって決まる。これは、フォトン1個の反跳運動量と飽和時の電子の運動量の拡がりとの比である。 $\bar{\rho} \leq 1$ の場合に量子効果が表れる。

量子 FEL パラメーターは、

$$\bar{\rho} = \rho \frac{mc\gamma}{\hbar k_r} = \gamma \rho \frac{\lambda_r}{\lambda_c}$$

で与えられる。ここで、 ρ は、従来の古典力学の FEL パラメーターであり、 λ_r は放射波長、 λ_c はコンプトン波長である。

現在の主流である SASE-FEL は、空間コヒーレントしかない。量子 FEL は時間コヒーレントも持つ理想的レーザーである。

2. ローゲイン FEL モデル

2.1 FEL ハミルトニアン

古典力学の FEL ハミルトニアンは、

$$H = \left\{ \left[\vec{p} - e(\vec{A}_u + \vec{A}_L) \right]^2 c^2 + m_0^2 c^4 \right\}^{1/2}$$

である。ここで、ヘリカル・アンジュレーターを選ぶ。

さらに、 $\vec{p} \cdot \vec{A}_L = \vec{p} \cdot \vec{A}_u = 0$ を利用して、近似し、

$$H \simeq \left[p_z^2 c^2 - ie^2 A_u (A_L e^{i(k_u+k_L)z-\omega t} - c.c.) \right] c^2$$

であり、規格化質量 $m^2 = m_0^2 + e^2 A_u^2 / c^4$ を定義した。

2.2 Bambini-Renier 座標系

シュレディンガー方程式を使うために、電子の運動速度に近い座標系を選ぶ。この新しい運動座標系に、プライム(')を付けて、

$$z = (z' + vt')\gamma' \quad t = (t' + vx'/c^2)\gamma'$$

ここで、 $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$ である。

位相の項は、

$$(k_u + k_L)z - \omega t = \left[k_L + k_u \left(1 - \frac{v}{c} \right) \right] z' - \left[\omega - \frac{v}{c} (k_u + k_L) \right] t'$$

であるが、時間依存性を消し去るために

$$\frac{v}{c} = \frac{k_L - k_u}{k_L + k_u}$$

とする。この速度 v の系では $k'_L = k'_u$ である。これ以後、 $k = k'_L = k'_u$ とする。

2.3 数値計算

上記座標系に乗った電子1個のハミルトニアンは、

$$H = \frac{p^2}{2m} + \hbar\omega \left(a_L^\dagger a_L + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \left(a_u^\dagger a_u + \frac{1}{2} \right) + i\hbar g \left(a_L^\dagger a_u e^{-i2kz} + a_u^\dagger a_L e^{i2kz} \right)$$

である。前節の議論から、 $\omega = \omega_L = \omega_u$ である。第1項は電子の運動エネルギー、第2項は、レーザー・フォトンのエネルギー、第3項は、アンジュレーター・フォトンのエネルギー、第4項は相互作用を表し、 g はカップリング定数である。

FEL 動作は、アンジュレーター・フォトンが消滅し、レーザー・フォトンが生成する。電子の運動量は $2\hbar k$ だけ下がる。この状況は、シュインガー演算子 S を用いて簡略化される[2]。つまり、演算子 $S_z \equiv p/\hbar k$ 及び $S^\pm = \exp(\pm ikz)$ を導入する。電子の運動量を

$$S^+ |m\rangle = |m+1\rangle \quad S^- |m\rangle = |m-1\rangle$$

のように、上げ下げできる。

[#] carpio.ai.185@gmail.com

波動関数を、

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle |m\rangle$$

と展開する。ただし、条件

$$n + m = \text{const}$$

が付く。

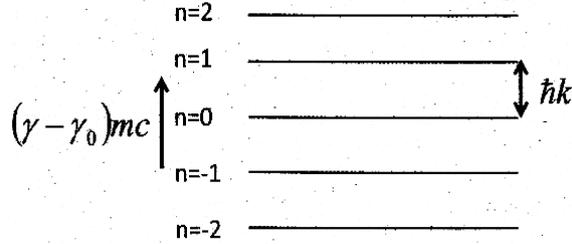


Figure 1: The exchange between electron momentum states via the electromagnetic field in discrete amounts is shown.

静止している電子に光子が衝突する[2]。 $|n\rangle$ は、光子の状態、以下の性質があり、

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle$$

n は光子数で、 \hat{a}^\dagger や \hat{a} は、光子の生成と消滅の演算子である。以下の性質

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

がある。

また、 $|m\rangle$ は、電子の運動量の状態であり、

$$\hat{p} |m\rangle = m |m\rangle$$

である。

ヒルベルト空間で、

$$|n, m\rangle = |n\rangle \otimes |m\rangle$$

と書ける[3]。

ハミルトニアンから

$$\hat{p} + \hat{a}^\dagger \hat{a} = \text{const}$$

であり、つまり、

$$n + m = \text{const}$$

である。初期状態を真空とする。

$$|\psi\rangle_{\bar{z}=0} = |0, 0\rangle$$

これは、 $n + m = 0$ でもあるから、

$$|n\rangle \equiv |n, -n\rangle$$

である。つまり、電子の運動量が減ると同時に光子が生成される。この様子を、図 1 に示した。

状態ベクトル $|\Psi\rangle_{\bar{z}}$ が

$$|\Psi\rangle_{\bar{z}} = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(\bar{z}) |n\rangle$$

のように、展開できるとする。

シュレディンガー方程式

$$i \frac{\partial |\Psi\rangle_{\bar{z}}}{\partial \bar{z}} = \hat{H} |\Psi\rangle_{\bar{z}}$$

に代入して、

$$\dot{C}_n = -i C_n n \left[\frac{n}{2\bar{\rho}} - \delta \right] + \sqrt{\bar{\rho}} [C_{n-1} \sqrt{n} - C_{n+1} \sqrt{n+1}]$$

を得る。

この式を数値計算して、図 2 を得る。これは、ラビ振動である。

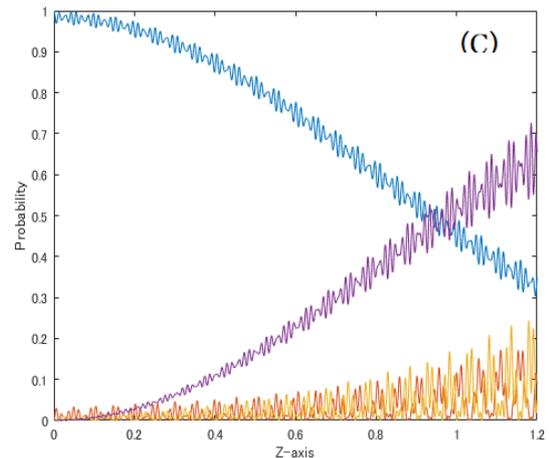
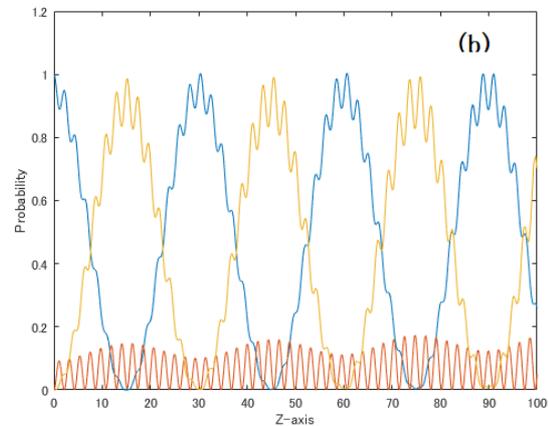
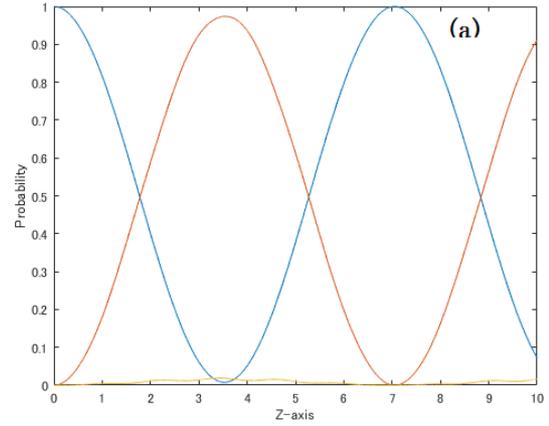


Figure 2: The transition probabilities are plotted along the normalized distance \bar{z} at $\bar{\rho} = 0.2$ for (a) $\delta = 1/2\bar{\rho}$ (b) $\delta = 1/\bar{\rho}$ (c) $\delta = 3/2\bar{\rho}$.

3. ハイゲイン FEL モデル

3.1 集団効果

ハイゲイン FEL は、多数電子の集団効果による不安定性を利用する。多粒子系の量子力学を基礎にして進める。 N_e 個の電子の FEL モデルを第2量子化する[4]。ボソンによる物質場を仮定する。この場合は光速に近い速度で動く。

物質場の演算子を $\widehat{\Psi}(\theta, \bar{z})$ とする。

$$\text{交換関係 } [\widehat{\Psi}(\theta), \widehat{\Psi}(\theta)^\dagger] = \delta(\theta, \theta')$$

$$\text{規格化条件 } \int_0^{2\pi} \widehat{\Psi}(\theta)^\dagger \widehat{\Psi}(\theta) = \widehat{N}_e$$

を満たす。

第2量子化のハミルトニアンは

$$\widehat{H} = \int_0^{2\pi} \widehat{\Psi}(\theta)^\dagger H(\theta, p) \widehat{\Psi}(\theta) d\theta$$

で定義され、

$$\widehat{H} = \sum_{j=1}^{N_e} \left\{ \frac{\hat{p}_j^2}{2\bar{\rho}} - i \sqrt{\frac{\bar{\rho}}{N_e}} [\hat{a} e^{i\theta_j} - \hat{a}^\dagger e^{-i\theta_j}] \right\}$$

である。

ハイゼンベルグ方程式は

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \widehat{\Psi}}{\partial \bar{z}} &= [\widehat{\Psi}, \widehat{H}] \\ &= -\frac{1}{2\bar{\rho}} \frac{\partial^2 \widehat{\Psi}}{\partial \theta^2} + i \sqrt{\frac{\bar{\rho}}{N}} (a^\dagger e^{-i\theta} - a e^{i\theta}) \end{aligned}$$

である。電界の成長は、

$$\frac{d\bar{A}}{dz} = \int_0^{2\pi} |\Psi(\theta, z)|^2 e^{-i\theta} d\theta + i\delta\bar{A}$$

である。ただし、規格化条件

$$\int_0^{2\pi} |\Psi(\theta, \bar{z})|^2 d\theta = 1$$

が付いている。

運動量をベースにして、この物質波は

$$\widehat{\Psi}(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n u_n(\theta)$$

と表現できる。ここで、

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(in\theta)$$

である。これは、固有値 n を持つ運動量 p の固有関数である。直交関係

$$[c_n, c_m^\dagger] = \delta_{n,m}$$

を利用し、上記の式に代入して、

$$\begin{aligned} \frac{dc_n}{d\bar{z}} &= -i \frac{n^2}{2\bar{\rho}} - \bar{\rho} (A c_{n-1} - A^* c_{n+1}) \\ \frac{dA}{d\bar{z}} &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n c_{n-1}^* + i\delta A \end{aligned}$$

2準位レーザーとして簡略化して、次の式を得る。

$$\frac{dA}{d\bar{z}} = c_{-1}^* + c_1 + i\delta A$$

この式から、数値計算ができ、その結果を、図 3, 図 4, 図 5 に示す。

存在確率は $|c_n|^2$ であり、バンチングは

$$b = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n c_{n-1}^*$$

である。

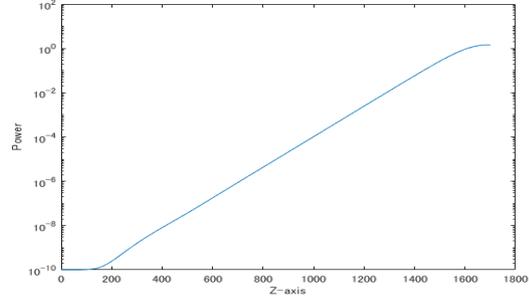


Figure 3: The evolution of radiation intensity is shown in the case of $\bar{\rho} = 10$, $\delta = 0$.

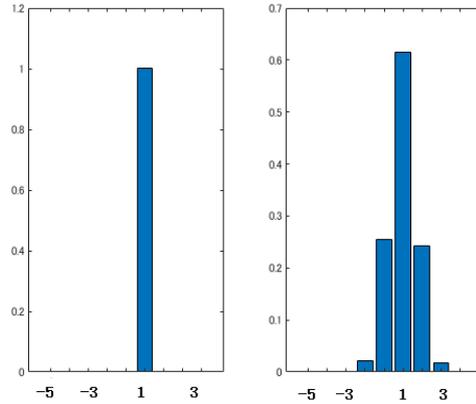


Figure 4: The electron momentum distributions are shown. The right figure shows in the case of $\bar{z} = 0$ and the left figure shows in the case of $\bar{z} = 10$.

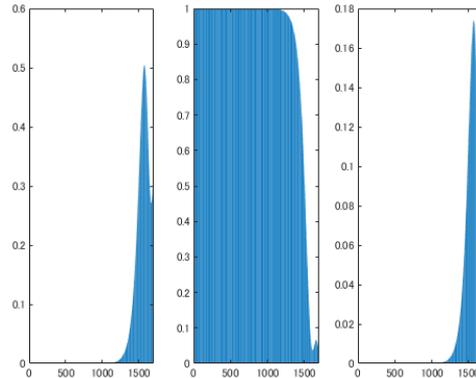


Figure 5: The bunching process along the z-axis are shown in the case of $|c(-1)|$, $|c(0)|$, $|c(1)|$ from left.

上記の式を計算すると、頻繁に数値不安定が起こる。おそらく、安定化する方法があるのだろうが、本研究ではウイグナー関数法に進む。

3.2 分散方程式

線形近似して、以下のような式を得る[5]。

$$\begin{aligned}\bar{A} &= 0 + \bar{A}^{(1)} \\ C_0 &= 1 + C_0^{(1)} \\ \frac{dC_{-1}}{d\bar{z}} &= -\frac{i}{2\bar{\rho}}C_{-1} + \bar{\rho}\bar{A}^* \\ \frac{d\bar{A}}{d\bar{z}} &= C_{-1} + C_1 + i\delta\bar{A}\end{aligned}$$

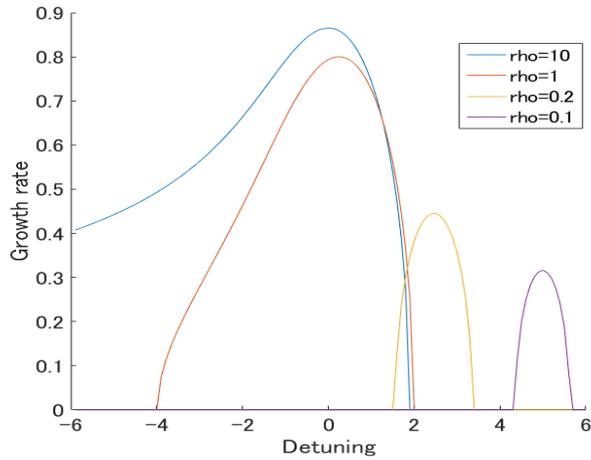


Figure 6: The graphs show growth rate against detuning for different value of quantum FEL parameters rho.

上記の変数 C_1, C_{-1}, \bar{A} が、 $\exp(i\Lambda\bar{z})$ のように振舞うと仮定して、分散方程式

$$(\Lambda - \delta)\left(\Lambda^2 - \frac{1}{4\bar{\rho}^2}\right) + 1 = 0$$

を得る。

量子 FEL パラメーター $\bar{\rho} = \text{rho} = 10, 1, 0.2, 0.1$ における分散方程式の解を図 6 に示す。を境に、それより大きい場合は古典解で、小さくなるに従い量子解である。図 6 から解るように、量子 FEL ではゲインが低く、飽和まで長い距離を有する。

3.3 離散ウイグナーモデル

この節では、積分型の式を研究する。数値計算の安定性がよいだろうと予想できる[6]。

FEL の基本方程式は

$$\begin{aligned}i\frac{\partial\psi}{\partial\tau} &= -\frac{1}{\bar{\rho}}\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2} - \frac{i\bar{\rho}}{2}[Ae^{i\theta} - c.c.]\psi \\ \frac{dA}{d\tau} &= \int_0^{2\pi} d\theta |\psi|^2 e^{-i\theta} + \frac{-i\delta}{\bar{\rho}}A\end{aligned}$$

である。ここで、ウイグナー関数 W_m

$$W_m = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta e^{-2im\theta'} \psi^*(\theta - \theta') \psi(\theta + \theta')$$

を導入する。これに対して

$$\psi(\theta) = \sum_m c_m e^{im\theta}/2\pi$$

を代入して、新たな変数の定義

$$\begin{aligned}w_m^{2n} &= c_{m+n}^* c_{m-n} \\ w_{m+1/2}^{2n+1} &= c_{m+n+1/2}^* c_{m-n} \\ w_m^0 &= |c_m|^2\end{aligned}$$

を用いて

$$W_n = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[w_m^n + \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{m-m'-1}}{(m-m'-1/2)} w_{m'+1/2}^n \right] e^{in\theta}$$

を得る。

確率条件は

$$\int_{-\tau}^{\tau} d\theta W_m = |c_m|^2 \quad \sum_m W_m = |\psi(\theta)|^2$$

を満たす。

基本方程式は

$$\begin{aligned}\frac{\partial w_s^n}{\partial\bar{z}} &= -in\frac{s}{\bar{\rho}}w_s^n + \frac{\beta}{\bar{\rho}}(w_{s+1}^n - w_s^n) \\ &+ \bar{\rho} \left[(A + i\sigma b) \left(w_{s+1/2}^{n-1} - w_{s-1/2}^{n-1} \right) \right. \\ &\quad \left. + (A - i\sigma b) (w_{s+1/2}^{n+1} - w_{s-1/2}^{n+1}) \right]\end{aligned}$$

となる。電場の成長は

$$\frac{dA}{d\bar{z}} = b + i\delta A$$

になる。これらの式を基礎にして、具体的な量子 FEL のデザインができる。

4. 量子 FEL の設計

4.1 全体設計

文献[4]は、設計例を出している。レーザー・アンジュレーターを用いるのでコンパクトである。電子銃は、極めて厳しい条件であるが、開発が動いている。

Table 1: Set of Design Parameters

QFEL parameter	0.2
Pierce parameter	6×10^{-5}
Beam energy γ	36
Peak current	863A
Normalized emittance	0.05nm-rad
Radiation wavelength	2Å

4.2 電子銃

文献[7]にある装置の外観を図7に示す。上部のレーザーで照射し、レンズで絞り、次のレンズで円偏光にする。次の板には、回折格子があり、2重の六方晶系の錘ができて、ルビジウム原子を導入し、横から原子を励起するためのレーザーを導入している。最後に静電場で電子を外に引き出す。

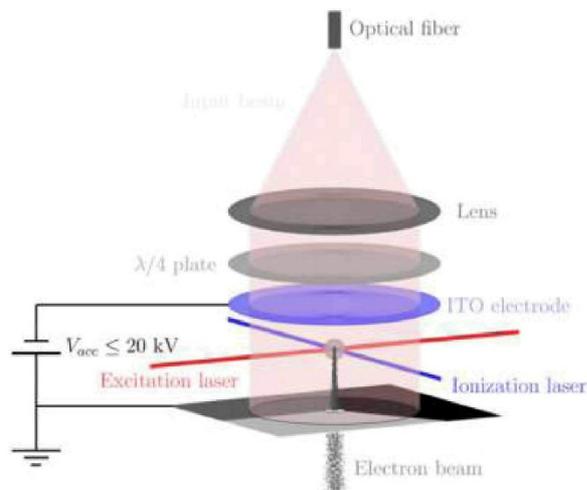


Figure 7: Ultracold electron source.

4.3 アンジュレーター

レーザー・アンジュレーターは、1980年代から提案されているが、成功は難しい。通常の永久磁石アンジュレーターの周期は $\sim\text{cm}$ であり、レーザー・アンジュレーターの周期は $\sim\mu\text{m}$ である。両者の中間くらいの周期でのアンジュレーターも提案されている。結晶やプラズマを利用するタイプやウェイク・フィールドを利用する提案が出ている。後者の一例として文献[8]の概念図を図8に示す。

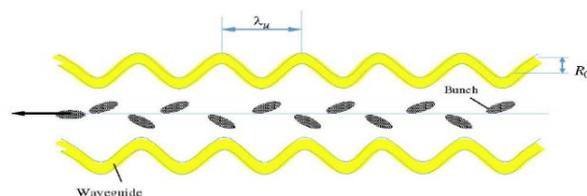


Figure 8: Wakefield undulator based on a sinusoidal dielectric waveguide is shown.

参考文献

- [1] J. M. J. Madey, H. A. Schwettman and W. M. Fairbank, "A FREE ELECTRON LASER", IEEE PAC, 1981, 980-982.
- [2] M. ORSZAG, "On the quantum theory of the free electron laser", OPTICA ACTA, Vol. 31No. 3, 1984, 267-270.
- [3] R. Bonifacio and H. Fares, "A fully quantum theory of high gain free electron laser", EPL 115, 2016, 34004.
- [4] Luca vole, "3D Quantum theory of Free Electron Lase", LAMBERT Academic Publishing, 2010.
- [5] G. R. M. Robb, 'The Quantum Free-Electron Laser', Proceeding of the CAS-CERN Accelerator Scholl, CERN-2018-001-SP.
- [6] B. H. Schaap, S. Schouwenaars and O. J. Luiten, "PROPOSAL FOR A QUANTUM FREE ELECTRON LASER DRIVEN BY ULTRA COLD ELECTRON ", 40th International Free Electron Laser Conference, Trieste, 13-15.
- [7] J. G. H. Franssen, T. C. H. de Raadt, M. A. W. van Nimhuijs and O. J. Luiten, "Compact ultracold electron source based on a grating magneto-optical trap", Phy. Rev. Accel. Beams 22, 2019, 023401.
- [8] I. L. Sheinman, and O. S. Alekseeva, "WAKEFIELD UNDULATOR BASED ON A SINUSOIDAL DIELECTRIC WAVEGUIDE", 27th Russian Particle Acc. Conf., 202), 274-276.