

光伝搬に外部境界条件を組み込んだ自由電子レーザーのシミュレーション NUMERICAL SIMULATION OF FREE-ELECTRON LASER WITH BOUNDARY CONDITION OF RADIATION FIELD

坂本文人^{*,A)}, 加藤龍好^{B)}, 本田洋介^{B)}, 島田美帆^{B)},
阪井寛志^{B)}, 中村典雄^{B)}, 谷川貴紀^{B)}, 羽島良一^{C)}

Fumito Sakamoto^{*,A)}, Ryukou Kato^{B)}, Yosuke Honda^{B)}, Miho Shimada^{B)},
Hiroshi Sakai^{B)}, Norio Nakamura^{B)}, Takanori Tanikawa^{B)}, Ryoichi Hajima^{C)}

A) National Institute of Technology, Akita College

B) High Energy Accelerator Research Organization

C) National Institutes for Quantum Science and Technology

Abstract

In the compact Energy Recovery Linac (cERL) at KEK, an infrared Free-Electron Laser (FEL) oscillation test is being conducted. Experiments and simulations have shown that the spatial distribution of the electron beam is so small that the light emitted from the electrons diverges greatly due to diffraction effects. The diverging light repeatedly propagates through interference with the vacuum duct walls of the beamline, but the existing simulation code does not consider the interaction between the external boundary and the light, which may compromise the reliability of the analysis results. Then we added a function to set boundary conditions to the 3D time-domain FEL simulation code GENESIS 1.3, which is widely used for FEL simulation. In this paper, we summarize the details of the boundary conditions and the embedding method to GENESIS 1.3. In addition, the simulation results of cERL-FEL are also reported.

1. はじめに

KEK のコンパクトエネルギー回収型リニアック (cERL) では、次世代高輝度光源の有力候補とされる自由電子レーザー (FEL) の発振試験が行われている。この FEL は材料変換技術などへの応用をターゲットとした波長 $20 \mu\text{m}$ の中赤外 FEL で、これまでの実験では波長 $11 \sim 20 \mu\text{m}$ 、電子ビーム 1 バンチあたりのパルスエネルギー 5.9 nJ/bunch の水平偏光を持った増幅光の発生が確認されている [1]。

実験の前段階に実施した FEL の数値シミュレーションでは、アンジュレータ出口以降の自由空間において FEL 光が急激に発散し真空ダクトに干渉するほどの大きさとなることが示されており、FEL 光の空間分布や出力特性に与える影響が問題視されていた。FEL 光が発散する原因は、電子ビームの transverse 平面におけるビーム径が非常に小さく、特に垂直方向はアンジュレータ中において $\sigma_y \sim \mu\text{m}$ のオーダーであり、FEL 波長である $20 \mu\text{m}$ に対して光源サイズは回折限界となっていることから、光の回折効果による発散と理解できる。

一般的な FEL シミュレーションコードは、空間の解析領域を光源サイズに対して十分大きく取るため、光と外部境界との相互作用は考慮されることはない。cERL で展開されている FEL のように自由空間において光が大きく発散し真空ダクト径と干渉するような場合は、外部境界の影響を考慮した FEL 計算を行い、実験結果と比較することが重要である。我々は光と外部境界の相互作用を含んだ FEL 計算を実現させるため、広く FEL シミュレーションに用いられる GENESIS 1.3 [2,3] の光伝搬計算へ、外部境界に対する光の境界条件を設定する機

能を独自に組み込み、外部境界の影響を考慮に入れた FEL シミュレーションを試みた。本論文では、GENESIS 1.3 へ外部境界条件を組み込む方法と、cERL における FEL シミュレーションの結果について報告する。

2. 光伝搬の数値計算

2.1 放射場の偏微分方程式と差分式

GENESIS 1.3 における光伝搬の計算には、3次元直交座標系 (x, y, z) が採用されており、 z 軸が電子ビームが進行する方向 (アンジュレータ軸) である。Transverse (x, y) 平面における座標は、 x 軸が水平、 y 軸が垂直方向となる。任意の空間地点における放射電場 $u(x, y, z)$ は、光の回折度合いと電子ビームからの放射寄与を考慮して、以下の偏微分方程式で表現される [4]。

$$\left(\nabla_{\perp}^2 + 2ik \frac{\partial}{\partial z} \right) u = s. \quad (1)$$

ここで u は任意の空間地点における複素表現された電場、 s は電子ビームからの放射強度、 k は光の波数である。

GENESIS 1.3 では、直交座標系の各軸に対して有限の空間区分に分割し、 z 方向へ進行する 1 ステップ (Δz) 毎に Eq. (1) の差分近似解を求めている。偏微分方程式の数値解法には、計算コストの削減と解の安定性から、1 ステップをさらに半分分割して半ステップ毎に x, y 各方向に陰解法と陽解法を交互に行う交互方向陰解 (ADI) 法が用いられている。半ステップ ($\Delta z/2$) 毎に分割し、前半の半ステップに一次陰解法を、後半の半ステップに一次陽解法を施すと、放射場 u の z 方向に関する 1 階偏微分は半ステップ毎の和として以下のように表現できる。

$$\frac{\partial u}{\partial z} \simeq \frac{u^{z+\Delta z/2} - u^z}{\Delta z/2} + \frac{u^{z+\Delta z} - u^{z+\Delta z/2}}{\Delta z/2}. \quad (2)$$

* saka@akita-nct.ac.jp

これを Eq. (1) に適用すると、 z から半ステップ毎に進んだ地点の放射場 $u^{z+\Delta z/2}$ と $u^{z+\Delta z}$ は以下ようになる。

$$u_{x,y}^{z+\Delta z/2} = u_{x,y}^z + i \frac{\Delta z}{4k} \left(\nabla_x^2 u_{x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} + \nabla_y^2 u_{x,y}^z \right) + s^{z+\frac{\Delta z}{2}} \frac{\Delta z}{2}, \quad (3)$$

$$u_{x,y}^{z+\Delta z} = u_{x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} + i \frac{\Delta z}{4k} \left(\nabla_x^2 u_{x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} + \nabla_y^2 u_{x,y}^{z+\Delta z} \right) + s^{z+\frac{\Delta z}{2}} \frac{\Delta z}{2}. \quad (4)$$

さらに x および y 方向に対する微小変化量をそれぞれ $\Delta x, \Delta y$ として二階偏微分を差分近似すると、最終的に以下の差分式を得る。

$$u_{x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} = \rho_{x,y}^z + u_{x,y}^z + \alpha \left(u_{x,y-\Delta y}^z - 2u_{x,y}^z + u_{x,y+\Delta y}^z \right), \quad (5)$$

$$u_{x,y}^{z+\Delta z} = \rho_{x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} + u_{x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} + \alpha \left(u_{x-\Delta x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} - 2u_{x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} + u_{x+\Delta x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} \right). \quad (6)$$

ここで、

$$\rho_{x,y}^z = s_{x,y}^z \frac{\Delta z}{2}, \quad (7)$$

$$\rho_{x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} = s_{x,y}^{z+\frac{\Delta z}{2}} \frac{\Delta z}{2}, \quad (8)$$

$$\alpha = \frac{i\Delta z}{4k\Delta_{x,y}^2} \quad (9)$$

とおいた。ここで得られた Eq. (5) および (6) を空間全ての点に対して考えると、この差分式は 3 重対角行列の固有値問題となっており、考えている空間の外部領域に於いた境界条件を適切に設定し、行列の解を求めることで任意の空間地点における放射場 $u_{x,y}^z$ を得ることができる。

2.2 外部境界に対する放射場の境界条件

ここではアンジュレータ磁場が垂直 (y) 成分のみを持つプラナー型アンジュレータのみを考える。すなわち FEL の偏光は水平偏光であって光電場ベクトルは外部境界の左右面に対しては垂直に、上下面に対しては水平に接することとなる。この境界条件を設定するため、境界の左右面に対しては光電場ベクトルの接線成分がゼロとなるよう $\partial u / \partial x = 0$ とするノイマン条件を課すこととする。また、上下面に対しては光電場ベクトルが全反射するよう $u = 0$ とするディリクレ条件を課している。なお、[3] で配布されている GENESIS 1.3 は、左右上下面全てに対してディリクレ条件が課されている。

真空封止型アンジュレータを除く通常のアンジュレータに用いられる真空ダクトは、横方向に平たい形状をしている。一方で GENESIS 1.3 では、Transverse 平面の

解析領域を正方形で設定し、 x 方向と y 方向の分割幅は同一に $\Delta x = \Delta y = \Delta$ となるようにプログラム全体で取り扱われており、両者を独立に設定することはできない。そのため、ここでは Fig. 1 に示すように Transverse 平面のうち、真空ダクト外となる上下領域は光電場を強制的にゼロとなるようにした。

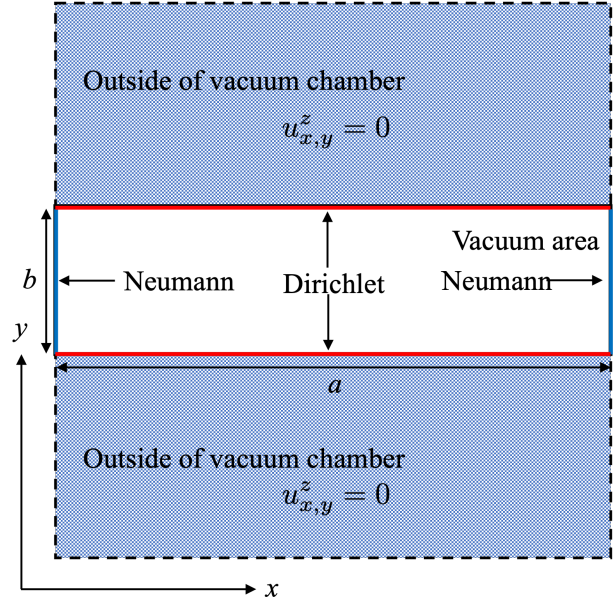


Figure 1: Calculation area and its boundary condition.

3. 計算結果例

3.1 計算結果の検証

境界条件を導入した GENESIS 1.3 による計算結果の妥当性を検証するため、複数の異なる光伝搬計算手法による結果の比較を行った。比較には筆者が独自に開発した信頼性のある時間領域差分 (FDTD) 法による結果と、Przeres によって開発された FFT 計算による矩形導波管中の電磁場伝搬解析の結果 [5] を比較に用いた。文献 [5] に用いられている矩形導波管形状と伝搬する光の初期条件を同一とし、改良を加えた GENESIS 1.3 の計算を行なった結果を Fig. 2 に示す。この結果は文献 [5] の Fig. 12 に示された結果および FDTD による結果と良好に一致しており、境界条件を導入した GENESIS 1.3 により、水平偏光した光の伝搬計算が可能であることが確認できた。

3.2 cERL-FEL の FEL シミュレーション

次に cERL における中赤外 FEL のシミュレーションを行なった。シミュレーションに用いた主な電子ビーム、アンジュレータ、および計算条件の値を Table 1 に示す。なお、cERL-FEL に関しては文献 [1] に詳細がある。シミュレーションは従来行われていた Transvers 空間の計算領域を $x = y = 50$ mm とし、全ての境界面における境界条件をディリクレ条件とした場合と、Fig. 1 に示す真空ダクト形状と光電場の境界条件を設定した場合の両方を行なった。なお、cERL のアンジュレータ中に

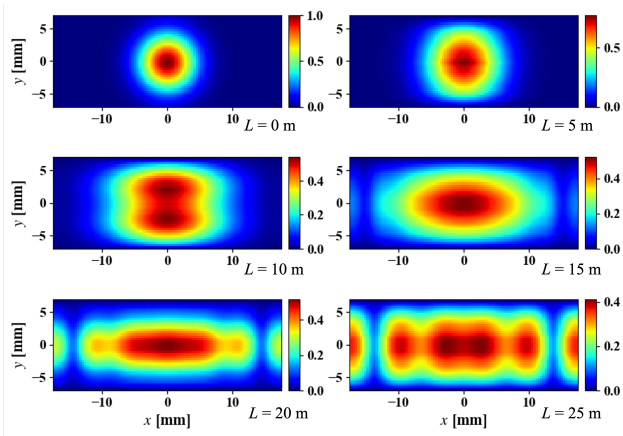


Figure 2: The horizontally polarized light profile (electric fields) in the waveguide at various distances L from waveguide entrance. Size of waveguide is $x = 35$ mm and $y = 14$ mm, wavelength = $10 \mu\text{m}$, and the input size of the Gaussian wave is 3 mm in RMS.

Table 1: Setting parameter for FEL simulation of cERL-FEL

Electron beam	Energy (γ)	34.7
	Bunch Charge	60 pC
	Norm. emittance (x)	$4.52 \mu\text{m}$ (rms)
	Norm. emittance (y)	$1.80 \mu\text{m}$ (rms)
	Bunch duration	1.94 ps (rms)
	Energy spread ($\Delta\gamma/\gamma$)	6.22×10^{-3} (rms)
Undulator	Strength (a_w)	0.97
	Period (λ_u)	24 mm
	Total length	3 m \times 2
FEL	Resonant wavelength	$20 \mu\text{m}$
	Simulation area	$x = 50$ mm $y = 50$ mm
	Vacuum area	$x = 50$ mm $y = 8$ mm

おける真空ダクトには断面が $x = 50$ mm、 $y = 8$ mm の楕円のもの採用されているが、ここでは簡単のため長方形形状を想定した。真空ダクトによる影響を考慮しない場合の光の空間分布を Fig. 3 に示す。アンジュレータ出口から 360 mm おきの伝搬による空間分布の変化を示しているが、アンジュレータ内においては最低次モードが優先的に増幅される光ガイディングの効果により FEL は点形状となっているが、アンジュレータを出ると光の回折効果によって大きく発散し、現実には真空ダクトが存在する $y = \pm 4$ mm の境界を大きく越えているのが確認される。一方、真空ダクトの形状と光電場の境界条件を設定した結果を Fig. 4 に示すが、真空ダクト境界において光電場が反射により干渉し、複雑な空間分布を形成しつつ伝搬する様子が確認される。

FEL 特性の結果として、FEL パルスエネルギーの成長過程を Fig. 5 に、FEL パルス波形を Fig. 6 に示す。これ

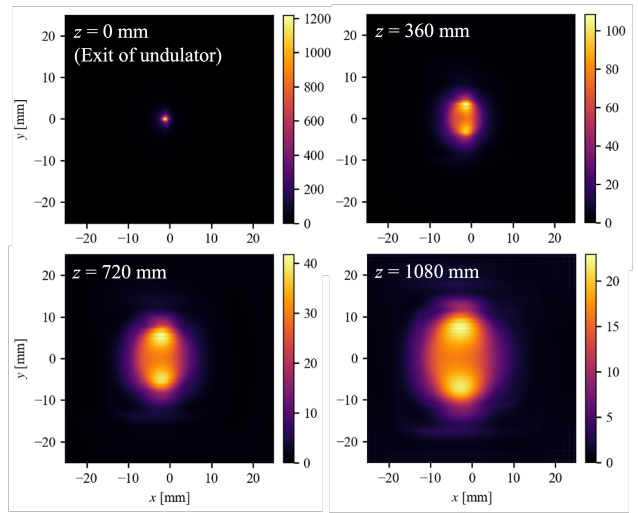


Figure 3: Spatial distribution of radiation in transverse plane at various distances from the undulator exit computed by original GENESIS 1.3.

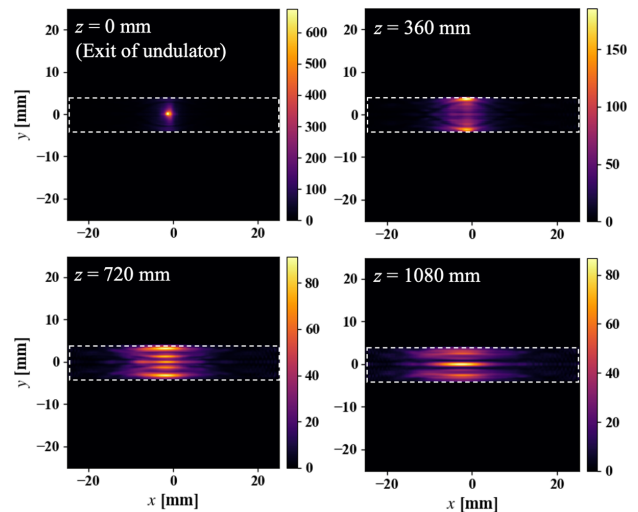


Figure 4: Spatial distribution of radiation in transverse plane at various distances from the undulator exit computed by modified GENESIS 1.3 (with boundary conditions).

らの結果からは、当初懸念されていた真空ダクトと光の相互作用が FEL へ与える影響はこの結果からは見られない。

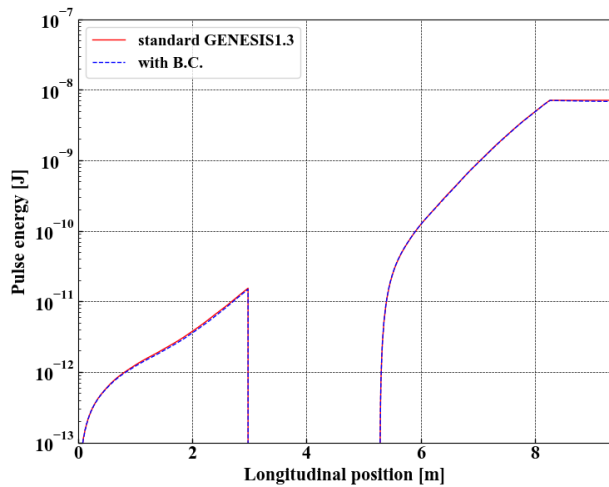


Figure 5: Energy evolution of FEL pulse. Solid line is original GENESIS 1.3 and dotted line is modified one (with boundary conditions).

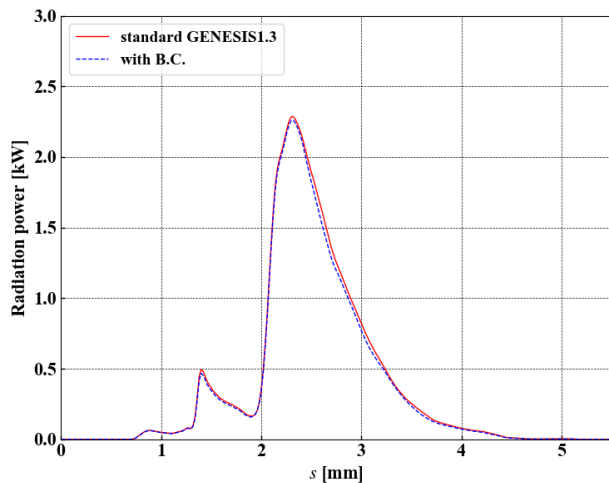


Figure 6: Pulse shape of FEL pulse. Solid line is original GENESIS 1.3 and dotted line is modified one (with boundary conditions).

を進めていく。

参考文献

- [1] Y. Honda *et al.*, “Construction and commissioning of mid-infrared self-amplified spontaneous emission free-electron laser at compact energy recovery linac”, *Rev. Sci. Instrum.* 92, 113101 (2021). doi:10.1063/5.0072511
- [2] S. Reiche, “GENESIS 1.3 : a fully 3D time-dependent FEL simulation code”, *Nucl. Inst. Meth. A* 429 (1999) 243.
- [3] <https://github.com/svenreiche/Genesis-1.3-Version4>
- [4] C. Pellegrini, A. Marinelli, S. Reiche, “The physics of x-ray free-electron lasers”, *Rev. Mod. Phys.*, 88, 015006 (2016). doi:10.1103/RevModPhys.88.015006
- [5] R. Prazeres, “Numerical method for full calculation of the electromagnetic field in a rectangular waveguide within overmoded configuration, using the fast Fourier transform”, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.*, (2014) 68: 20501 doi:10.1051/epjap/2014140132

4. まとめと今後の展開

cERL-FEL において懸念事項となっていた光の回折効果による FEL へ与える影響を考察するため、既存の GENESIS 1.3 に外部境界における光の境界条件を取り入れた。シミュレーションの結果から、FEL 光はアンジュレータ出口から真空ダクト壁面において反射しつつ複雑な空間分布を形成しながら伝搬していくことが確認されたが、FEL 特性へ与える影響はこれらの結果からは見られなかった。

FEL 計算に光の境界条件を加えることで、外部境界を導波路と見立てた、いわゆる waveguideFEL の計算も可能となる。真空ダクト形状を調整し、光の位相速度・群速度を最適化させることによるゼロスリッページ FEL のシミュレーションなどへの適用についても、今後検討