Дифракция фемтосекундных импульсов XFEL (РЛСЭ) на кристаллах, self-seeding и другие интересные явления (лекция)



В.А. Бушуев



Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия



e-mail: vabushuev@yandex.ru



49-я Школа ПИЯФ по Физике Конденсированного Состояния 16-21 марта 2015

План лекции

- 1. Основные принципы работы РЛСЭ (XFEL)
- 2. Возможные применения излучения XFEL (когерентный imaging, что важнее амплитуда или фаза ?, как восстановить фазу и т.п.)
- 3. Дифракция импульсов XFEL
- 4. Особенности дифракции сверхкоротких рентгеновских импульсов
- 5. Режим self-seeding для повышения степени временной когерентности и мощности XFEL
- 6. О тепловыделении
- 7. Анекдот с картинками (быль ??)

Том Круз

MISSION:IMPOSSIBLE



COMING SOON









1. Основные принципы работы РЛСЭ (XFEL)



Оптический лазер на атомных переходах

Рентгеновский (гамма) лазер с ядерной накачкой

- 1.Фантастические требования к мощности накачки (Л.А. Ривлин 1962, Р.В. Хохлов 1972)
- 2. Накачка от ядерного взрыва (В.И. Гольданский, Ю.М. Каган - 1973)
 В.А. Бушуев, УФН, <u>114</u>, 678 (1974)
- СОИ стратегическая оборонная инициатива "Империя зла", "Звездные войны", платформы с ядерными зарядами в космосе – президент США Р. Рейган, бывший киноактер (1973)
- 4. Асимметричный ответ СССР "**ржавые** болты и гайки", 8 км в секунду и.....

Рентгеновский лазер на свободных электронах (РЛСЭ)



Projects: 1. European XFEL (Germany, Hamburg)

- 2. LCLS (USA, Srenford)
- 3. Japanese XFEL (Japan, SPring 8)



SASE-1 XFEL parameters:

E ≈ 17 GeV, $\Delta \tau \approx 100$ fs, $\tau_0 \sim 0.1$ -0.2 fs, $\delta \tau \sim 0.3$ -0.5 fs; $r_0 \sim 50$ μm, $\Delta \theta \approx 1$ μrad = = 0.2 arc.sec, Pmax ≈ 10 GW, P ~ 40 W. Photons per pulse - 10¹² $\frac{S_{\text{XFEL}}}{S_{\text{SR}}} = 10^9$

European XFEL distances:





Формирование микробанчей за счет обратного влияния рентгеновского излучения на электроны в ондуляторе

Basic principles of X-ray free electron lasers



Self-Amplified Spontaneous Emission (SASE)



3. With complete micro-bunching all electrons radiate in phase. This leads to a radiation power growth as N^2 .

2. The shot noise of the electron beam is amplified to complete micro-bunching.

1. All *N* electrons can be treated as individually radiating charges, and the resulting spontaneous emission is proportional to *N*. **6/86**



X-ray free electron laser starting from the shot noise in the electron beam has been proposed by Derbenev, Kondratenko, and Saldin (1979, 1982); and also by Bonifacio, Pelegrini and Narducii (1984).

Юрков Михаил Шнейдмиллер Евгений – "наши люди"

Ratio of XFEL and SR brilliances:

$$\frac{S_{\rm XFEL}}{S_{\rm SR}} = 10^9$$

Временная структура импульсов EU XFEL

 $\Delta E/E \approx 10^{-3}$ Hard X-ray (SASE1 and SASE2) Wavelength: 0.05 – 0.16 nm (a) 60 Bunch charge: 0.02 – 1 nC !! P (GW) Photons/pulse: $(0.1 - 20) \times 10^{11}$ **Pulse Energy: 20 – 2500 μJ** 20 Average power: 0.7 – 70 W t^{150} (fs) t^{200} 50 250 300 **XFEL SASE-I** 10-100 fs



Linac Coherent Light Source (LCLS) – одиночные импульсы, 120 Гц

8/86



The scheme and arrangement of XFEL elements SASE - Self Amplification Spontaneous Emission ("самоусиливающаяся спонтанная эмиссия").

XFEL Facilities









FLASH is a small brother of the European XFEL

FLASH





New hard X-ray FELs under construction:

- European XFEL
- Korean FEL
- Swiss FEL

Hard X-ray (SASE1 and SASE2) FEL radiation ^{13/86} typical main parameters

Radiation wavelength	0.1 nm		
Bunch charge	0.02 nC	1 nC	
Pulse duration	10 fs	100 fs	
Source size (FWHM)	29 µm	49 µm	0.2-03
S. divergence (FWHM)	1.9 µrad	1.3 µrad	угл.с.
Spectral bandwidth	1.9×10 ⁻³	1.0×10 ⁻³	
Coherence time	0.13 fs	0.23 fs ←	
Degree of the			
transverse coherence	0.95	0.71 ←	High !!
Photons/pulse	0.3×10 ¹¹	6.4×10 ¹¹	
Pulse energy	58 μJ	1260 µJ	

Th. Tschentscher, XFEL.EU Technical Note TN-2011-001)

... а сейчас будет кино...

Стратификация (модуляция) сгустка электронов по мере увеличения длины пути в ондуляторе

$$I \sim N_{_{\rm ЭЛ}}$$

$$I \sim N_{_{\mathrm{ЭЛ}}}^{2}$$





Time structure of a single XFEL pulse^{15/86}



Geloni G., Saldin E., Samoylova L., et al., New Journal of Physics 12, 035021 (2010).

Time structure of a single XFEL pulse fragment



Spike - острый выступ, шип, гвоздь, костыль

Спектр случайного импульса XFEL



17/86







Coherence Properties of Individual Femtosecond Pulses of an X-Ray Free-Electron Laser

I. A. Vartanyants,^{1,2,*} A. Singer,¹ A. P. Mancuso,^{1,†} O. M. Yefanov,¹ A. Sakdinawat,³ Y. Liu,³ E. Bang,³ G. J. Williams,⁴ G. Cadenazzi,⁵ B. Abbey,⁵ H. Sinn,⁶ D. Attwood,³ K. A. Nugent,⁵ E. Weckert,¹ T. Wang,⁴ D. Zhu,⁴ B. Wu,⁴ C. Graves,⁴ A. Scherz,⁴ J. J. Turner,⁴ W. F. Schlotter,⁴ M. Messerschmidt,⁴ J. Lüning,⁷ Y. Acremann,⁸ P. Heimann,⁹ D. C. Mancini,¹⁰ V. Joshi,¹⁰ J. Krzywinski,⁴ R. Soufli,¹¹ M. Fernandez-Perea,¹¹ S. Hau-Riege,¹¹ A. G. Peele,¹² Y. Feng,⁴ O. Krupin,^{4,6} S. Moeller,⁴ and W. Wurth¹³

22/86





Функция пространственной когерентности



24/86

25/86

2. Возможные применения XFEL



Исследование изменения электронной структуры атомов и молекул в зависимости от времени (рентгеновское "кино" химических реакций)

XFEL filming (pump and probe)

28/86



Штриховая линия – пучок молекул, направляемых в пучок РЛСЭ; красная и синяя линии – импульсы РЛСЭ после расщепления кристаллами (**DESY illustration**).

Рентгеновское изображение отдельных биологических молекул



- (a) упрощенная схема эксперимента в геометрии на прохождение (Lawrence Livermore National Laboratory),
- (b) схема эксперимента в геометрии на отражение (DESY)

H.N. Chapman, Nature 448, 676-679 (2007)

Imaging биомолекул с помощью фемтосекундных импульсов РЛСЭ



"Кулоновский взрыв" молекулы T4 lysozyme под действием рентгеновского импульса

R. Neutze, et al., Nature (2000) 406, 752.

29/86

Когерентная рентгеновская дифракция

(безлинзовая X-ray микроскопия)



30/86



Main problem in a single particle imaging: Low scattered signal from a single bio-molecule in a single pulse
Imaging of biomolecules with femtosecond X-ray pulses



To obtain a 3D image of biological samples with sub-nanometer resolution many *reproducible* copies will need to be measured

Прямое и обратное преобразования Фурье



Преобразования Фурье

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(q) \exp(iqx) dq$$

$$F(q) = A(q)e^{i\varphi(q)}$$

35/86

Что важнее – амплитуда или фаза поля ??

Есть две фотографии – Исаак Ньютон и Бритни Спирс. ...Оцифровываем изображения и делаем прямые и обратные Фурье-преобразования.....

F=A(Ньютон)exp[iq(Бритни Спирс)]

Что (кто) получится ??!!

Прямое Фурье-преобразование



Фурьеамплитуды



D.Novikov (DESY)





Теперь переходим в прямое пространство





Фурьефазы, а все ______ А=1 !!





Исаак Ньютон

Итерационный алгоритм восстановления фазы



I.A.Vartanyants (DESY)

Пример реконструкции (I. Vartanyants, A. Efanov, DESY, 2010)



Замена

Расчетные дифракционные картины от микрокристаллов





Strong fringes from facet pairs
Streaks perpendicular to facets

I. Vartaniants, I. Robinson, J. Phys. 13, 10593 (2001)

Когерентное рассеяние на кристаллах Аи





SEM эксперимент

Au film
Quartz substrate
Annealed at 950 C for 70 hrs

Экспериментальная дифракционная картина

I.Robinson, et al., PRL (2001) 87, 195505

Когерентная рентгеновская дифракционная томография



I.Vartaniants, I.Robinson, J. Phys. 13, 10593 (2001) 3. Особенности дифракции фемтосекундных импульсов РЛСЭ

Закон Вульфа-Брэгга

 $2d\sin\vartheta = n\lambda$

44/86



Sketch of Laue and Bragg diffraction geometries

3D-особенность импульсов XFEL

Приближение плоской волны.....



.....теория Эвальда, Дарвина, Такаги....формулы Френеля, Парратта, Колпакова, Игнатовича...

Типичные значения глубины экстинкции – несколько микрометров

$$\Lambda = \lambda (\gamma_0 \gamma_h)^{1/2} / \pi C |\chi_h|$$
 - глубина экстинкции.





КДО Си K_{α} -излучения от кристалла кремния с толщиной $l = 1 \ \mu m$ (1), 2 μm (3) и 10 μm (3); симметричное отражение (220).





Still no diffraction











Dynamics of diffraction in time *R*-pulse



Dynamics of diffraction in time





The end of pulse reflection





Reflected pulse

$$E_{R}(x,z,t) = \iint R(k_{x},\omega)E_{0}(k_{x},\omega)e^{ik_{hx}x-i\sqrt{k^{2}-k_{hx}^{2}}z-i\omega t}dk_{x}d\omega$$
$$k_{hx} = k_{x} + h_{x}, k = \omega/c.$$

$$A_{R}(x,z,t) = \iint R(q,\Omega)E_{0}(q,\Omega)e^{i\varphi_{S}+i\varphi_{D}}dqd\Omega$$

$$\varphi_{S}(q,\Omega) = q \times (x - zctg \,\vartheta_{R}) - \Omega \times (t - \frac{z}{c \sin \vartheta_{R}}) - \mathbf{Shift}$$

$$\varphi_D(q,\Omega) = -\frac{1}{2k_0\gamma_h^3} \left(q - \frac{\Omega\cos\theta_R}{c}\right)^2 z - \text{broadening !!}$$

Bragg case, b = -1, $\tau_0 = 0.1$ fs



l - $r_0 = 100 \text{ }\mu\text{m}$, $\tau_0 = 0.1 \text{ fs}$, A1=1, A2=0.5, $\Delta t = 1 \text{ fs}$; *2* – reflected pulse ($\lambda = 0.154 \text{ }\text{nm}$, $d = 5 \text{ }\mu\text{m}$, Si(220).

Bragg case

b = -1



Space-temporal intensity distribution of the reflected pulse; incident pulse duration is $\tau_0 = 0.1 \text{ } \phi \text{c}$.

49/86

b = -2

Laue-reflection of two supershot pulses ("spikes")



2D-distribution of amplitude $|A_h(x_p, z_p)|$

51/86



$L = 2 \mathrm{cm}$

L = 10 cm



 $d = 23.19 \ \mu\text{m}, L_D = 8.2 \text{ cm}$, inclination angle of the reflected pulse $\varphi_h = -41.2^0 \ (l_0 = 0.3 \ \mu\text{m})$.



Space-temporal distribution of reflected pulse at $\tau_0 = 1$ fs (*a*) and $\tau_0 = 0.1$ fs (*b*). Symmetrical Laue case, b = 1, $\lambda = 0.154$ nm, Si(220), d = 7.73 µm.



Fig. 5. Intensity distributions at different distances from the first crystal in Laue geometry. The distances are 0.05 m (a), 1 m (b), 2 m (c), other parameters are the same as in Fig. 3.

Деградация (распад) R-импульса





1200 м 2100 м

Схема будущего Х-лазера (не в масштабе) при виде сверху и сбоку. Красные и желтые линии показывают пути распространения электронных и фотонных пучков

Two-fold Laue-reflection of the XFEL pulse fragment

56/86



Diffraction reflection of **XFEL pulse fragment** (by M.Yurkov calc.) on **two crystals** in the Laue-geometry; crystals thickness is 98 μ m.



Time coherence functions of an incident pulse $\gamma(\tau)$ (1) and the diffracted pulse $\gamma_R(t_{max}, \tau)$ after the 1st (2) and the 2nd (3) Laue-crystals.

Pulse with narrow peak: 2 µm, 50fs+5fs 58/86




Как – сделать когерентную затравку для дальнейшего усиления в ондуляторе

Цель – повысить степень временной когерентности импульсов XFEL, увеличить их интенсивность

4. Режим self-seeding (самопосев)



Bragg case

Pulse transmission in Bragg geometry

T-pulse

61/86



Bandwidth down to 10⁻⁵

62/86

Прохождение в геометрии Брэгга



Spectral transmission curve $|T(\Omega)|^2$ (1) and a spectrum of the incident pulse $S(\Omega)$ (2). Parameters: $\lambda_0 = 0.15$ nm, $\tau_p = 0.15$ fs; diamond, reflection (400), crystal thickness $l = 100 \ \mu$ m.

Cascade self-seeding scheme with wake monochromator for narrow-bandwidth X-ray FELs

Gianluca Geloni, Vitali Kocharyan, Evgeni Saldin (2010)



Bandwidth down to 10⁻⁵

G. Geloni, V. Kocharyan, E. Saldin, A simple method for controlling the line width of SASE X-ray FELs, DESY 10-053 (2010).

R. R. Lindberg, and Yu. V. Shvyd'ko, Time dependence of Bragg forward scattering and self-seeding of hard x-ray free-electron lasers // ArXiv: 1202.1472v3 (9 Mar 2012) (Advanced Photon Source, Argonne National Laboratory, Argonne, IL 60439, USA).

ARTICLES

PUBLISHED ONLINE: 12 AUGUST 2012 | DOI: 10.1038/NPHOTON.2012.180

Demonstration of self-seeding in a hard-X-ray free-electron laser

J. Amann¹, W. Berg², V. Blank³, F.-J. Decker¹, Y. Ding¹, P. Emma⁴*, Y. Feng¹, J. Frisch¹, D. Fritz¹,

J. Hastings¹, Z. Huang¹, J. Krzywinski¹, R. Lindberg², H. Loos¹, A. Lutman¹, H.-D. Nuhn¹, D. Ratner¹,

- J. Rzepiela¹, D. Shu², Yu. Shvyd'ko², S. Spampinati¹, S. Stoupin², S. <u>Terentyev³</u>, E. Trakhtenberg²,
- D. Walz¹, J. Welch¹, J. Wu¹, A. Zholents² and D. Zhu¹

nature

hotonics

- 1. SLAC National Accelerator Laboratory, Stanford, California 94309, USA,
- 2. Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois 60439, USA,
- 3. Technical Institute for Superhard and Novel Carbon Materials, Troitsk, Russia 14, 190,
- 4. Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California 94720, USA.

Self-seeding scheme with wake monochromator for narrow-bandwidth X-ray FELs 66/86

[1] G. Geloni, V. Kocharyan, E. Saldin, DESY 10-053 (2010)



67/86

Влияние теплового разогрева кристалла на дифракцию импульсов РЛСЭ

...Для сравнения:

1.Утюг - 5 \text{ Bt/cm}^2;



2. ТВЭЛы на АЭС - 200 Вт/см²

3. XFEL - 3-10 кВт/см²



68/86



 $N = 10^{11}$ фотон/имп, T = 200 K, алмаз типа IIa _{69/86}



 $N = 10^{11}$ фотон/имп, T = 200 K, алмаз типа IIa _{70/86}



 $N = 10^{11}$ фотон/имп, T = 200 К, алмаз типа IIa _{71/86}



 $N = 10^{11}$ фотон/имп, T = 200 К, алмаз типа IIa _{72/86}











Специальная благодарность

В.Е. Дмитриенко

за существенный вклад в название моего доклада

"... и другие интересные явления"

Но это еще не все....







Несколько слов и картинок в качестве пожеланий студентам, аспирантам и молодым ученым



Как Вы думаете - кто это такой ??

Это типичный молодой ученый

Примечание:

Слегка глуповатый вид и некая лопоухость – это явление временное (по моим оценкам от 3-х до 6-ти лет без права не читать и не писать) Dear young scientists !! В настоящий момент Вы весьма малограмотны, слабо информированы и не совсем хорошо знаете физику..... Now you are not an absolutely competent physicists. Now you do not know a great volume of information and knowledge.

But it is your advantage and strength. In this connection I shall tell to you one story.

It is an old good anecdote or joke. But it is quite possible, that it was actually in a life...... I very wish to hope !!

80/86



Hospital

Imagine, that the hospital burns. A fire (пожар в больнице).

There come fire brigade. They run with the water and fire extinguishers.

At last they have extinguished a fire. Hurray !!! **Ypppa** !!





The commander of firemen reports to the head medical doctor: "We have arrived in 10 minutes, in 20 minutes the fire was killed.



Unfortunately there are losses. <u>Three</u> patients were lost. They have died.

But five patients we have saved and returned to the life. Now they are alive and healthy !"



The head medical doctor slowly falls down on the ground. It is a faint.



After 5 minutes he comes to the senses, rises and asks the main fireman:

"Do you know, what you extinguished ??"





The fireman answers: "I do not know".

The doctor – "You extinguished a morgue, near a crematorium....



It is very good, when not quite competent people could make such acts, which could not make the professional doctors.

I very much hope, that you, as a young scientists, will make a such great discovery and inventions, which could not make more oldest and experienced physicists!!

Вот такой оптимистический The End !!!

Желаю всяческих успехов в науке и в жизни !!

Thank for your attention





