

加速器束流动力学期刊论文导读 (2023 年 11 月)

受“京师物理”公众号启发，我们几个同好便萌生将加速器领域的代表性期刊 Physical Review Accelerators and Beams (PRAB) 里的论文进行导读。主要 (但不限于) 导读材料选自 PRAB 近期上线的期刊，与部分美国物理学会 (American Physical Society, APS) 旗下的其它期刊或过去 PRST-AB、Elsevier 的核物理与技术 Nuclear Instruments and Methods (NIM) 期刊等可能涉及加速器方面的论文。与超快电子衍射成像动力学相关的论文则不在此限。

预期论文导读将于每个月初收集后发布，在 http://faculty.hust.edu.cn/jcytsai/zh_CN/article/2191806/content/1551.htm#article 可以找到过去的导读文档。限于成员水平，导读仍许多地方有待改进 (正)。任何关于导读内容的指正、建议、意见都欢迎提出、交流，我们期待从交流讨论中激发的可能研究课题。

本期 (2023 年 11 月) 结果统计如下表

成员姓名	导读列表	联系方式
蔡承颖	[1]、[2]、[3]、[4]、[5]	jcytsai@hust.edu.cn
李嘉鹏	[??]	

目录

1	自由电子激光的飞秒偏振极化整形 [PRL 131] Femtosecond Polarization Shaping of Free-Electron Laser Pulses	3
2	人工智能时代下的科研 [Nature 620] Scientific discovery in the age of artificial intelligence	4
3	阿秒时间分辨率的电子显微镜 [Nature 619] Attosecond electron microscopy of sub-cycle optical dynamics	6
4	X 射线激光振荡器的居量反转 [PNAS 117] Population inversion X-ray laser oscillator	11
5	纳米芯片上的单电子自由电子激光 [APL Photonics 7] Single-electron nano-chip free-electron laser	14

1 自由电子激光的飞秒偏振极化整形 [PRL 131]

Femtosecond Polarization Shaping of Free-Electron Laser Pulses

1.1 基本信息

- 分类：同步辐射与自由电子激光
- 作者：Giovanni Perosa et al. (主要机构：Elettra-Sincrotrone Trieste)
- 类型：实验
- 链接：<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.131.045001>

以下部分取自“京师物理”公众号 PRL 导读。

1.2 摘要 & 总结

这篇论文演示了偏振极化随时间变化的极紫外自由电子激光 (free-electron laser, FEL) 脉冲的产生。为了在飞秒时间尺度上实现偏振调制，这篇论文提出将由两个交叉偏振波荡器产生的两个相对延迟的相互反向旋转圆偏振子脉冲进行耦合。通过角分辨光电发射 (angle-resolved photoemission) 和氦的阈值以上电离 (above-threshold ionization) 来探测脉冲的偏振剖面；结果与含时薛定谔方程的解一致。

该方案的稳定性极限主要由电子束能量涨落决定，但一般条件下该涨落不会影响极紫外实验。研究结果证实了基于偏振极化整形的方案在提高分辨率和元素选择性方面的潜力，并可能引领用于探测和操纵物质中核心电子的新相干控制方案的发展。

2 人工智能时代下的科研 [Nature 620]

Scientific discovery in the age of artificial intelligence

2.1 基本信息

- 分类：其它
- 作者：Hanchen Wang et al. (主要机构：剑桥大学、加州理工学院)
- 类型：综述
- 链接：<https://www.nature.com/articles/s41586-023-06221-2>

以下部分内容取自“CNS 导读”公众号¹。

2.2 摘要

这篇论文阐述了人工智能工具用于科学研究的现状与挑战。作者们结合近来人工智能相关算法的发展，及其在分析大数据表征分析、指导产生科学假说 (hypotheses)、实验设计与模拟等方面的应用突出了人工智能在各层面提高科研效率，扩展探索边界的前景。

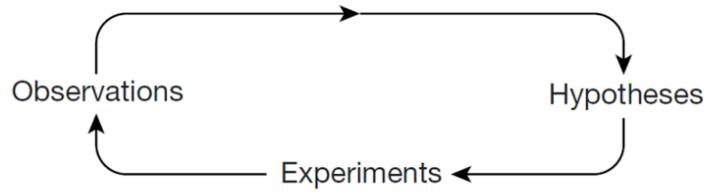
同时，这篇论文也指出目前存在人工智能工具使用上也存在一定的误用和混乱，后续需要通过多领域的合作提高人们对人工智能工具的理解和其产生数据正确的解读，优先让其以可靠的方式发挥作用并施加“保险措施”，从而提高获益降低风险。

2.3 贡献或创新点

- 贡献：人工智能系统可为科学认知做出贡献，使得无法通过其他方式进行可视化或探测的过程和对象得以调查，通过从数据构建模型并结合模拟和可扩展计算来系统地激发创意。为实现这一潜力，必须通过负责任且审慎的技术部署来解决伴随使用人工智能而来的安全和安全问题。在科学研究中负责任地使用人工智能，我们需要测量人工智能系统的不确定性、误差和效用水平。这种理解对于准确解释人工智能输出并确保我们不过度依赖可能有缺陷的结果至关重要。随着人工智能系统的不断发展，优先考虑可靠的实施并采取适当的保护措施，对于最小化风险并最大化收益至关重要。人工智能有潜力揭示以前无法触及的科学发现。

¹<https://mp.weixin.qq.com/s/i2fR190RzEzqXPLakXxvQw>

AI for science



Weather forecasting



Battery design optimization



Magnetic control of nuclear fusion reactors



Planning chemical synthesis pathway



Neural solvers of differential equations



Hydropower station location planning



Synthetic electronic health record generation



Rare event selection in particle collisions



Language modelling for biomedical sequences



High-throughput virtual screening



Navigation in the hypothesis space



Super-resolution 3D live-cell imaging



Symbolic regression

3 阿秒时间分辨率的电子显微镜 [Nature 619]

Attosecond electron microscopy of sub-cycle optical dynamics

3.1 基本信息

- 分类：超快电子成像
- 作者：David Nabben, Joel Kuttruff, Levin Stolz, Andrey Ryabov, Peter Baum (德国康斯坦茨大学)
- 类型：理论、模拟
- 链接：<https://www.nature.com/articles/s41586-023-06074-9>

3.2 摘要

几乎所有光与材料之间的相互作用的主要步骤是材料中的电子对可见光在其亚波长和亚周期尺度下的动力学过程。因此，理解和控制材料的电磁响应对于现代光学和纳米光子学至关重要。尽管电子束的德布罗意波长 (de Broglie wavelength) 很小，可以进入阿秒和 Å 尺度，但超快电子显微 (UEM) 和衍射 (UED) 的时间分辨率迄今受限于飞秒 (~ 50 fs) 时间尺度，这对于记录材料在可见光周期尺度上的基本响应是不足的。这篇论文将 UEM 推进到激光的一个周期内的阿秒时间分辨率。

这篇论文用连续激光来调制电子波函数，形成快速的电子脉冲序列，并使用能量滤波器在材料内外解析电磁近场，形成时空中的电影。在纳米结构针尖、介电共振器 (dielectric resonator) 和超材料天线 (metamaterial antenna) 上的实验揭示了手性表面波 (chiral surface wave) 的定向发射、偶极子和四极子动力学之间的延迟、亚光速埋藏波导场 (subluminal buried waveguide field) 以及对称性破缺的多天线响应 (symmetry-broken multi-antenna response)。这些结果表明将 UEM 和阿秒激光科学相结合，以在时空维度上理解光与物质的相互作用的基本尺度的潜在价值。

以下部分取自“PhotoniX”公众号²。

²https://mp.weixin.qq.com/s/SgI_iczG5o7uFil1StLw5Q

3.3 贡献或创新点

在微纳研究领域，TEM 在材料科学方面的应用较多，其中一个重要的用途就是研究光与物质之间的相互作用。具体来说就是用 TEM 观测超快激光 (Ultrafast laser) 与样品相互作用的过程。这对研究纳米材料的特性及其在现代光学、光电子学领域的应用有着极为重要的意义。用于此类研究的 TEM 设备被称为超快电子显微镜 (Ultrafast Electron Microscopy, UEM)。

从微观尺度来看，光与物质之间的相互作用主要通过入射光波所引发的物质内部微观粒子的电动力学响应来体现。这种响应在空间上为光的亚波长尺度，时间上为光的亚周期尺度。电子与光一样也具有波粒二象性，其德布罗意波长远小于光的波长，因此用 TEM 来研究光与物质的相互作用时，时间分辨率是主要问题。目前，UEM 的时间分辨率止步于飞秒量级 (fs, 10^{-15} s)。在可见光领域，比如 580 ~ 630 nm 的波长范围，100 飞秒的脉冲内包含 50 个左右的光波周期，因此 UEM 的时间分辨率还不足以记录光周期尺度上的基本材料响应。为了解决这一问题，这篇论文提出了一种具有阿秒时间分辨率 (as, 10^{-18} s) 的电子显微技术。

- 创新点：这篇论文主要思路是利用光电场周期性地给自由电子波函数进行加速和减速，从而将电子束调制成阿秒量级的超短电子脉冲。这样就能够满足研究光与物质相互作用的时间分辨率需求。具体的系统构成如图 1a 所示。

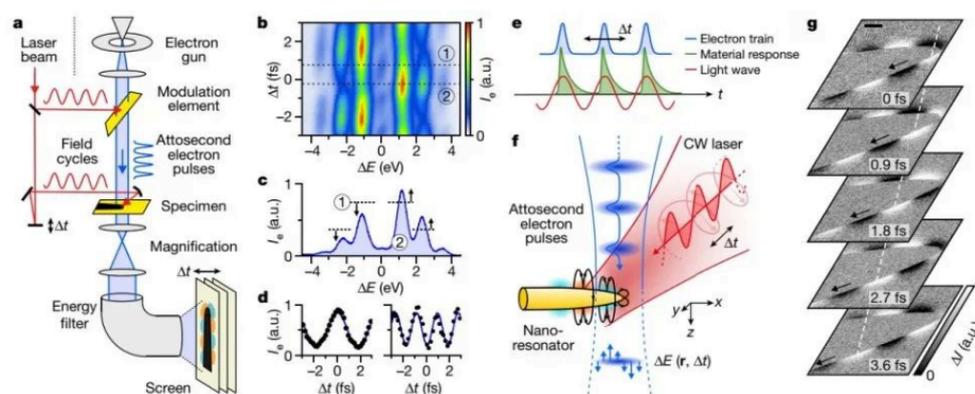


图1 阿秒分辨率的电子显微镜。利用时延 Δt 控制阿秒电子脉冲在某个光周期内测量的时刻。a. 连续激光器 (CW, 红) 发出的光经分束后分别用于激励压缩膜 (黄) 和纳米光子材料 (黑)。电子束经过压缩膜后形成阿秒电子脉冲用于材料检测。能量变化是时间延迟 Δt 的函数。b. 测量获得的具有不对称损益的时间能谱图。所用样品为200nm厚的硅膜。c. 图b中1号和2号时延处的沿虚线方向的能谱曲线。d. 图b中 $\Delta E=hc/\lambda$ (左) 和 $\Delta E=0$ (右) 处的时域曲线。e. 显微成像时序图，红色为光波、绿色为材料响应、蓝色为阿秒电子脉冲。f. 第一次实验的细节：蓝色为阿秒电子脉冲、红色为入射激光、黄色为钨针、橙色和青色表现探针周边局部电场。 $r \rightarrow$ 为位置矢量。g. 在激光周期内不同时刻测到的归一化能量损益图。图中比例尺为500nm，黑色箭头和白色虚线分别代表时间域和空间域的传播方向。

- 贡献：这篇论文所用 UEM 主要由高分辨透射电子显微镜 (肖特基场发射 183 keV) 和波长 1064 nm 的激光器 (周期 3.6fs) 组成。激光器的出射光分为两束，一束用来激励硅膜进而调制电子束产生阿秒级的电子脉冲；另一束经过延时 Δt (压电驱动) 后与待测样品相互作用。通过调整 Δt 就可以控制电子脉冲在激光周期内的不同时刻进行测量，时序如图 1e 所示。这篇论文用于电子束调制的硅膜厚度为 50 nm。这样的厚度一方面对电子和激光的吸收损耗可以忽略不计，另一方面又足以改变调制光的相位从而破坏洛伦兹力振荡的对称性。电子穿过调制硅膜时受到周期性光电场的作用，一部分被加速一部分被减速，从而合并成与调制光周期相同的具有阿秒量级脉宽的电子脉冲。这一过程类似于通信领域的载波和信号调制。调制时，入射光与电子束垂直，电子束以 34° 角入射到硅膜上以实现激光周期和电子束速度的匹配。

作者首先使用 200 nm 厚的硅膜作为样品测试电子脉冲的特性，测量结果如图 1b 到 d 所示。电子脉冲的脉宽约为 0.7 fs，电流约为 10 pA。在功能测试时，把样品换成尖端半径 150 nm 的钨针，使用线偏振光 (150 mW) 在 xy 平面内以 45° 角入射，所得结果如图 1f 所示。钨针被激励后产生沿着针尖传播的近场表面波。图 1g 展示了对应着图 1f 中 z 轴方向近场表面波的阿秒量级的能量损益测量结果。近场表面波的场矢量垂直于电子束方向的，在图 1g 中表现为能量增益 (白色)；平行于电子方向的表现则为能量损耗 (黑色)。从图中可以看出类似针尖的轮廓。针尖上下两行损益相反，体现出了针尖可以被看作是偶极子源的特性。在一个光周期内，增益从针尖逐渐向针身移动 (黑色箭头) 体现了近场表面波的演化过程 (白线虚线代表时间轴)。

接着，作者利用新型 UEM 研究了几种纳米材料的光学特性，其中最主要是等离子体针尖的近场时空手性分析 (如图 2 所示) 和介电纳米谐振器的时空响应观测 (如图 3 所示)。等离子激励光的手性问题对扫描近场显微镜、尖端增强光致发光和手性超材料的研究有重要意义。介电纳米谐振器的实验主要面对纳米级别的光子波前调制和高效频移装置的研究。

图 2 中的样品是一个尖端带有狭缝的扫描隧道显微镜探针，圆偏振光 45° 入射。图 2a 是样品显微图像。图 2b 是本文所提出的新型 UEM 的测量结果，同样可以看到等离子体场的定向传播。左旋激励主要集中在针尖的右下方，右旋激励主要集中在针尖的左上方。左旋和右旋激励的周期和相速度也有所不同：左旋激励的相速度为 $(1.4 \pm 0.1)c$ ，右旋激励则是 $(1.0 \pm 0.1)c$ 。这一现象可能是探针表面的等离子体波、激励出的平面波及其反射三者之间的相互作用造成的。图 2c 是探针的近场能量损益测量结果，对应图 2b 中上面一行第一幅图的黑色虚线轮廓。如图

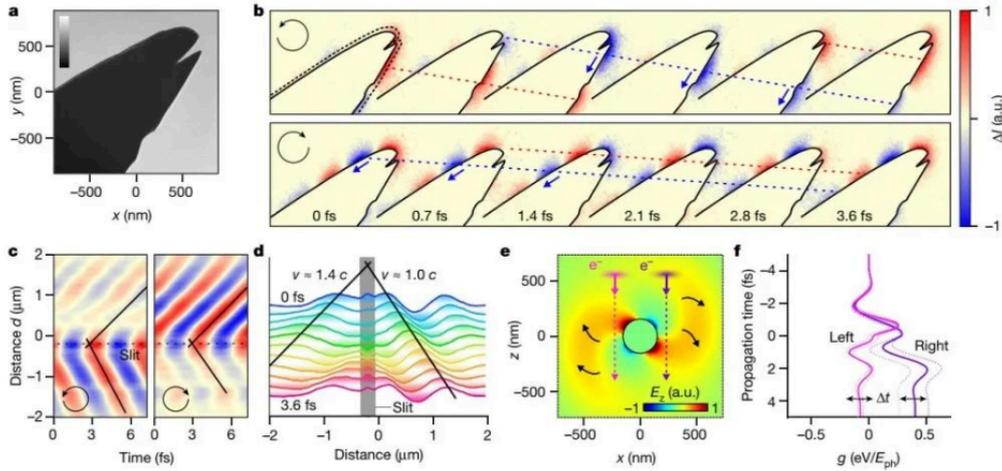


图2 带有狭缝的探针表面等离子激发实验。 a. 探针显微照。 b. 左旋(上)和右旋(下)激励的能量损益测量结果。箭头和虚线(波面)展示出了传播特性,增益(红),损耗(蓝)。 c. 图b上第一幅的黑色虚线处的能量损益。纵轴 $d < 0$ 代表右下角, $d > 0$ 为左上角。图中虚线代表狭缝的位置,实线代表相速度。 d. 对应图c的时域曲线图。灰色方块对应狭缝,黑实线为相速度, $d < 0$ 展示的是图c中的左旋激励数据, $d > 0$ 则展示右旋激励数据。可以看出等离子体的起源不在针尖($d = 0$),而是在狭缝处。 e. 实验过程的数值模拟,用于解释激励的手性敏感问题。黑色圆圈代表右旋激励的电场分量 E_z ,黑色箭头代表激励场随着时间的旋转方向。粉色和紫色虚线即代表了入射电子束的左右两部分,也表明了图f数据的来源位置。 f. 参数 g (代表能量变化)随着时间变化的曲线。虚线对应电子束入射时间 Δt 引起的差异。

2d 所示,通过对针尖 ($d = 0 \text{ nm}$) 上下两方各一个近场波动的追踪观测,作者发现等离子体波的起源不是针尖而是 $d \approx -200 \text{ nm}$ 处的狭缝(图中灰色方块)。

图 3a 展示了介电纳米谐振器实验所用的狭缝谐振器样品 (200 nm 厚的硅膜)。入射光为线偏振光,且沿硅膜短边方向振动。入射角为 45° ,功率为 1.3 W。图 3b 展示了样品表面场分布随时间演化的情况。图 3c 展示了四极子电磁场和偶极子电磁场的能量分布。两种场的强度随时间变化的曲线符合正弦分布,如图 3d 所示,两者之间有 $800 \pm 100 \text{ as}$ 的时延。

3.4 其它

这篇论文采用具有飞秒周期的激光来调制 UEM 中的电子束将其转化为具有阿秒量级脉宽的连续电子脉冲。在此基础上,作者充分利用电子脉冲与调制激光具有相同的周期这一优势,将调制激光分出一束照射样品,通过在光路中引入时延 Δt 来控制电子脉冲和光周期之间的时序关系,进而实现了光与物质相互作用过程的阿秒分辨率测量。

在成像方面,这篇论文使用了柱状电子能量滤波器来滤除零损耗峰值,确保只有能量获得增益或损耗 ($\Delta E > 1 \text{ eV}$) 的电子波函数能够参与成像,提高了实验结果的对比

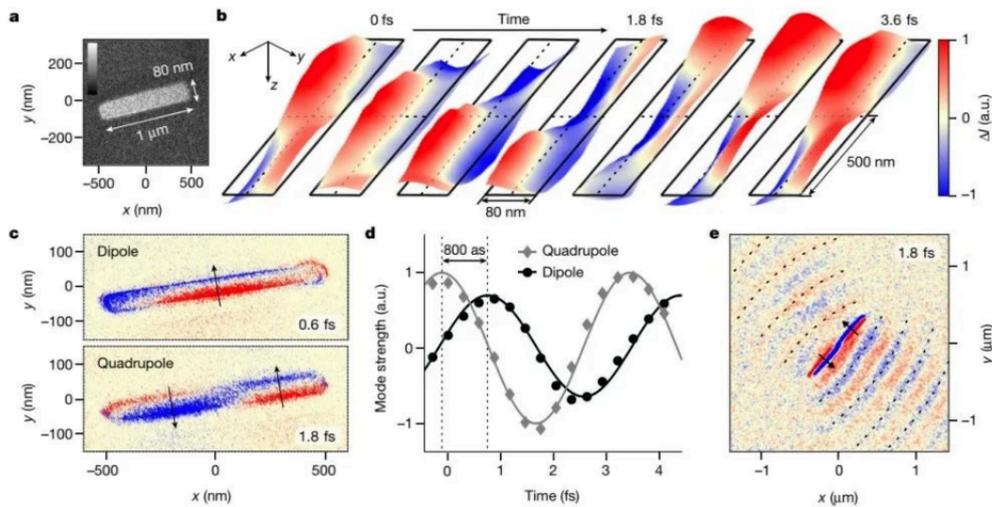


图3 介电纳米谐振器实验。 a. 介电纳米谐振器。 b. 在激发场的一个周期内，测量的电子能量随空间和时间而变化的情况。 c. 图b中 $t=0.6\text{fs}$ 处测得的偶极子模和 $t=1.8\text{fs}$ 时的四极子模。 d. 偶极子模和四极子模随时间变化的曲线呈正弦分布。 e. 纳米谐振器到膜材料中的二次辐射。

度。最终通过连续测量 (图 1 至 3 的测量时间不超过 4 分钟)，实现了对光与物质相互作用过程的动态观测和“电影式”展示 (分辨率 1024×1024 像素，每个光周期内 10 至 15 帧)。这篇论文成果对光与物质相互作用的基础理论研究有很好的推动作用，在近场光学、无源和有源超材料、光子集成、光化学等领域有着很好的应用潜力。

4 X 射线激光振荡器的居量反转 [PNAS 117]

Population inversion X-ray laser oscillator

4.1 基本信息

- 分类：同步辐射与自由电子激光
- 作者：Aliaksei Halavanau, Andrei Benediktovitch, Alberto A. Lutman , Daniel DePonte, Daniele Cocco , Nina Rohringer, Uwe Bergmann, and Claudio Pellegrini (主要机构：SLAC)
- 类型：理论、模拟
- 链接：<https://www.pnas.org/doi/full/10.1073/pnas.2005360117>

4.2 摘要

振荡器是光学激光器的核心，提供稳定、傅立叶变换极限 (transform-limited) 的脉冲。到目前为止，激光振荡器仅在红外到可见光和近紫外 (near-UV) 光谱范围内可用。这篇论文介绍了一项在 5-12 keV 光子能量范围内运行的振荡器研究，利用过渡金属化合物的 $K\alpha_1$ 谱线作为增益介质，X 射线自由电子激光器作为周期泵浦，以及布拉格晶体光学腔，可以构建产生强烈、完全相干、傅立叶变换极限脉冲的 X 射线振荡器。以铜硝酸盐增益介质生成的脉冲为例，每脉冲产生约 5×10^{10} 个光子，脉冲长度为 37 fs，光谱分辨率为 48 meV，光子能量为 8 keV。这篇论文对该系统进行了理论研究和模拟，结果显示，由于单次通过的增益非常大，振荡器在四到六个光学腔传输中就能达到饱和并完全相干。我们讨论了 X 射线光学腔以及振荡器实现所需的其它部分的可行性和设计，为扩展基于 X 射线的研究超越当前能力打开了途径。

4.3 贡献或创新点

- 创新点：不同于目前普遍研究的自由电子激光振荡器 (XFEL)，其增益介质为电子束与波荡器，这篇论文采用的概念“相对”回到传统，利用 $K\alpha_1$ 谱线作为增益介质，外部泵浦则利用单次经过高增益自放大自发辐射 (SASE) 产生的 X 射线激光，使 $K\alpha_1$ 谱线产生的光作为种子，在振荡器内往返反射、积累，形成居量反转，通过受激辐射产生激光。

- 贡献：原理示意图如下图，注意到 SASE FEL 作为外部泵浦，液体射流 (liquid jet) 里的溶液作为增益介质。

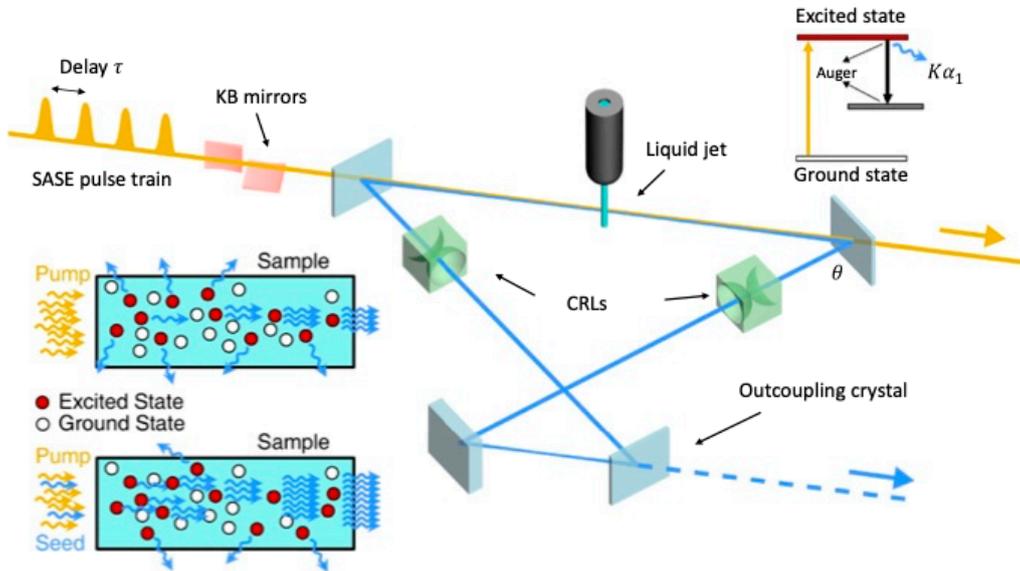


Fig. 1. XLO schematics. A train of SASE pump pulses with spacing τ passes through a semitransparent crystal and impinges on a liquid jet sample, creating population inversion. The first pulse generates ASE of the $K\alpha_1$ line, which is recirculated through a cavity with a roundtrip time that matches τ , seeding the stimulated emission in the subsequent passes. When saturation is reached after four to eight passes, the XLO pulse is outcoupled by rapidly switching the outcoupling crystal into an off-Bragg condition. Note that in the figure, the separation between X-ray pump pulses and the cavity size is not to scale. The energy diagram for population inversion (top right) and principles of ASE (middle left) and seeded stimulated emission (bottom left) are shown.

在振荡器中，需要分析 SASE FEL 光脉冲与 $K\alpha_1$ 谱线产生的光在谐振腔中的逐圈演化：

- 对第一圈来说，需要定量分析增益介质中的居量反转，如：电离过程截面、1-s 轨道能级、Auger 电子衰减时间等。利用 XATOM 程序模拟动力学过程，采 two-point correlation function 计算方法 [1]。
- 对第二圈之后， $K\alpha_1$ 谱线产生的自发辐射强度相比于上一圈放大的光场强度小得多可忽略，光在谐振腔增益介质内的演化过程，采数值求解一维 Maxwell-Bloch 方程。
- 光场在谐振腔中传输与布拉格晶体反射镜作用的分析，根据 X 射线动力学衍射理论，采 XOP 程序。

这篇论文最后给出了基于此方案的 XLO (x-ray laser oscillator) 与目前普遍研究的 XFEL 输出效能与振荡器参数的比较, 如下表, 可以看到几个指标的明显差异。特别注意到, XLO 仅需低频 (120 Hz) 的常温电子枪驱动 XFEL 即可, 而 XFEL 一般需要超导加速腔提供高重频电子束驱动 FEL。

Table 2. Comparison of some XLO and XFEL parameters at LCLS-II

Parameter	XLO	XFEL
Gain per pass	Up to 10^6	1.2 to 1.5
Cavity length, m	~ 10	> 260
Lasing medium size, m	3×10^{-4}	~ 100
Angular tolerance, μrad	1	~ 0.01
Number of photons (max)	5×10^{10}	10^{10}
Peak power, MW	~ 270	~ 4.7
Pulse length, fs	37.4	530
FWHM $\Delta t \Delta \omega$, fs·eV	1.8	4.4

FWHM, full-width at half-maximum.

参考文献

- [1] A. Benediktovitch, V. P. Majety, N. Rohringer, Quantum theory of superfluorescence based on two-point correlation functions, Phys. Rev. A 99, 013839 (2019). <https://journals.aps.org/prabstract/10.1103/PhysRevA.99.013839>

5 纳米芯片上的单电子自由电子激光 [APL Photonics 7]

Single-electron nano-chip free-electron laser

5.1 基本信息

- 分类: 同步辐射与自由电子激光
- 作者: Yen-Chieh Huang, Luo-Hao Peng, Hossein Shirvani, Wen-Chi Chen, Karthick-raj Muthuramalingam, Wei-Chih Wang, Andrzej Szczepkowicz (主要机构: NTHU)
- 类型: 理论、模拟
- 链接: <https://doi.org/10.1063/5.0097486>

5.2 摘要

传统的自由电子激光器虽然强大，但需要用高能相对论电子束来驱动。尽管最近已经利用 keV 电子束来激发材料芯片产生宽带辐射，但仍然追求能发出相干辐射的芯片尺寸自由电子激光。不幸的是，来自电子显微镜或介质激光加速器 (dielectric laser accelerator) 的这些 keV 电子发射器通常只能提供低电流、其离散运动的电子相隔几微米 (μm) 或数十微米。

为了设想芯片尺寸的自由电子激光器作为强大的研究工具，这篇论文研究了单个电子和位于纳米光栅介质波导上的单个电子阵列所能实现的激光辐射。在此研究中，由于分布反馈结构中电子与导波之间的强耦合，单个 50 keV 电子在长 31 μm 、厚 400 nm 和周期 310 nm 的硅光栅的 Bragg 共振处产生了 1.5 μm 类激光辐射。当由重复 0.1 PHz 的单个电子列驱动时，纳米光栅波导在激发频率的二次谐波处产生强烈的激光辐射。理论上预测并从模拟中观察到了由波导模式形成的 Smith-Purcell 辐射的离散频谱，这发生在纳米光栅波导上方的真空空间中。这项研究为需要紧凑高亮度电子和光子源的应用提供了机会。

5.3 贡献或创新点

- 创新点: “An accelerator chip could function as a radiation chip.” 目前许多研究投入在设计芯片上的粒子加速器，反过来想，其实也能够设计芯片上的辐射源。这篇论文基于目前既有的穿透式电子显微镜的电子束参数，基本上一次发出的电子平均只有一个，彼此相隔约 0.25 ps，即考虑单个电子单次经过介质光栅的辐射机

制。试图通过巧妙设计介质光栅 (材料选择、结构参数等) 与基质 (substrate), 使单个电子经过时, 产生相关辐射, 包含 Smith-Purcell、Cherenkov 等, 最终在有限长度介质光栅出口处得到约 200 THz 的辐射场。介质结构总体尺寸约 $31 \mu\text{m}$, 属新型微型加速器/辐射器结构。设计思路示意图如下图所示。

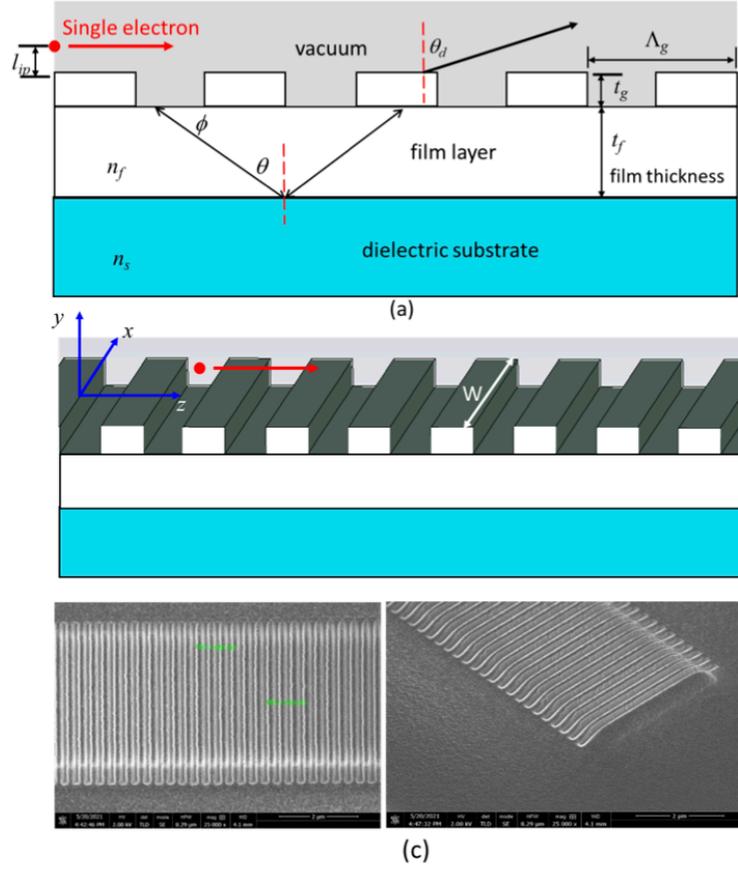


FIG. 1. A proposed dielectric-grating waveguide as a nano-chip FEL driven by a single keV electron. The distributed optical feedback and the guided field in the grating film increase the electron-wave coupling for the radiation process. (a) A 2-D configuration used in our theoretical modal analysis. (b) A 3-D configuration used for our time-domain radiation simulation. (c) Scanning-electron-microscope images of a fabricated silicon grating with 300-nm period and $4 \mu\text{m}$ width for an on-going feasibility study.

- 贡献: 这篇论文 Section II 给出了设计介质光栅结构相关的一些物理定律, 如: 介质波导 (film, grating waveguide) 与基质 (substrate) 间需要满足全反射, 则有

$$\sin \theta > \sin \theta_c = \frac{n_s}{n_f}$$

其中, n_s 为 substrate 的折射率, n_f 为 film 或光栅波导介质的折射率。低能电子 (动能约 50 keV) 与介质波导存在 Cherenkov 辐射, 存在如下关系

$$\cos \phi = \frac{1}{n_f \beta_e}$$

其中， θ 与 ϕ 的关系参考 Fig. 1。以上两式给出电子速度 β_e 的约束条件

$$\frac{1}{n_f} < \beta_e < \frac{1}{n_s}$$

电子掠过光栅表面时，库仑场在其表面产生的凋落波 (evanescent wave) 满足如下色散关系

$$(\omega/c_0)^2 = (\omega/v_e)^2 - \alpha^2$$

由此给出了电子的冲击参数 (impact parameter)

$$l_{ip} \sim h = \frac{1}{\alpha} = \frac{\beta_e \gamma \lambda_0}{2\pi}$$

其中， $\gamma \approx 1$ 为洛伦兹因子， λ_0 为真空中的辐射波长。

光栅周期结构提供共振模一种分布光反馈 (distributed optical feedback) 机制。要尽量保证电子与场最大耦合，即最大化光栅阻抗，凹槽深度 t_g 的估算由下式给出

$$t_g = \frac{\lambda_y}{4} = \frac{\lambda_0}{4n_f \sin \phi} = \frac{\beta_e \lambda_0}{4\sqrt{\beta_e^2 n_f^2 - 1}},$$

若要操作在单模情况，则限制 t_g 的条件还有

$$t_f < \frac{\lambda_0}{2\sqrt{n_f^2 - n_s^2}}$$

基于以上几个约束条件，下面 Table 1 给出了一组初步的介质光栅波导结构的设计参数。

TABLE I. The first-order design parameters for a 1.5- μm nano-chip FEL with a silicon ($n_f = 3.4$) grating waveguide on a glass substrate ($n_s = 1.5$).

Design wavelength (μm)	Electron energy (keV)	Grating period Λ_g (nm)	Grating depth t_g (nm)	Film thickness t_f (nm)	Impact parameter l_{ip} (nm)
1.5	50	310	160	240	100

介质光栅波导一般提供两种分布反馈机制：

- Bragg 共振 (Bragg resonance)：驻波、正向前进与反向后退的波叠加导致

– 返波振荡 (backward-wave oscillation): 群速度与电子前进方向相反

这篇论文的机制不同于以上两者, 属 Bragg 共振, 但主要是电子束与前向波的交互作用。电子束与 Bragg 共振关系形成的色散关系如图 Fig. 2 给出, 上排按 PTB 理论计算, 下排根据 COMSOL 模拟给出, 具良好一致性。允许存在的模式在虚线形成的中间区域内与电子色散关系的交点。

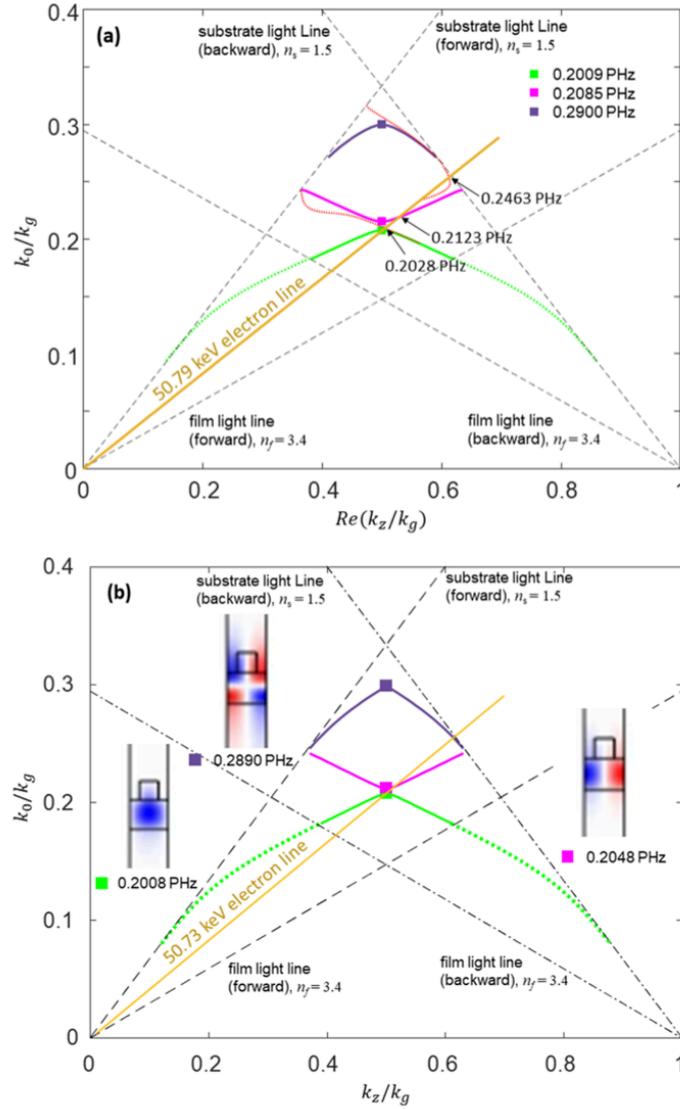


FIG. 2. The dispersion diagram calculated by (a) the PTB model and (b) COMSOL for the TM modes in the dielectric-grating waveguide specified in Table I. Both plots show the first Bragg resonance at $1.5 \mu\text{m}$ (0.200 PHz), intercepted by a ~ 50 keV electron line. In (a), the red dashed curves are low-loss leaky modes predicted by the PTB model. In (b), the zero-loss mode curves and the electron line match very well with those calculated by the PTB model. The insets show the H_x field patterns at the Bragg resonances, indicating strong guiding in the grating region. Outside the region boxed by the light lines, the mode is lossy and is not guided.

有了初步介质光栅波导的设计参数后, 这篇论文 Section IV 利用 CST 计算辐射场

特性。模拟结果如图 Fig. 3 给出，其中上排 (a-1, a-2) 为假想情况，即介质波导无限向下延伸，无基质；下面两排则按照 Table 1 参数给出。可以看到，在 (a-1) 存在明显的 Cherenkov 辐射，在 (b-1) 可以看到在介质波导内存在明显的 guided mode，且与理论预测一致，为 Bragg 模。(b-2) 给出的是在介质波导出口处的辐射场信号，可以看到 ring-down 时间结构，显示为相干场在介质波导结构内两端往返形成。

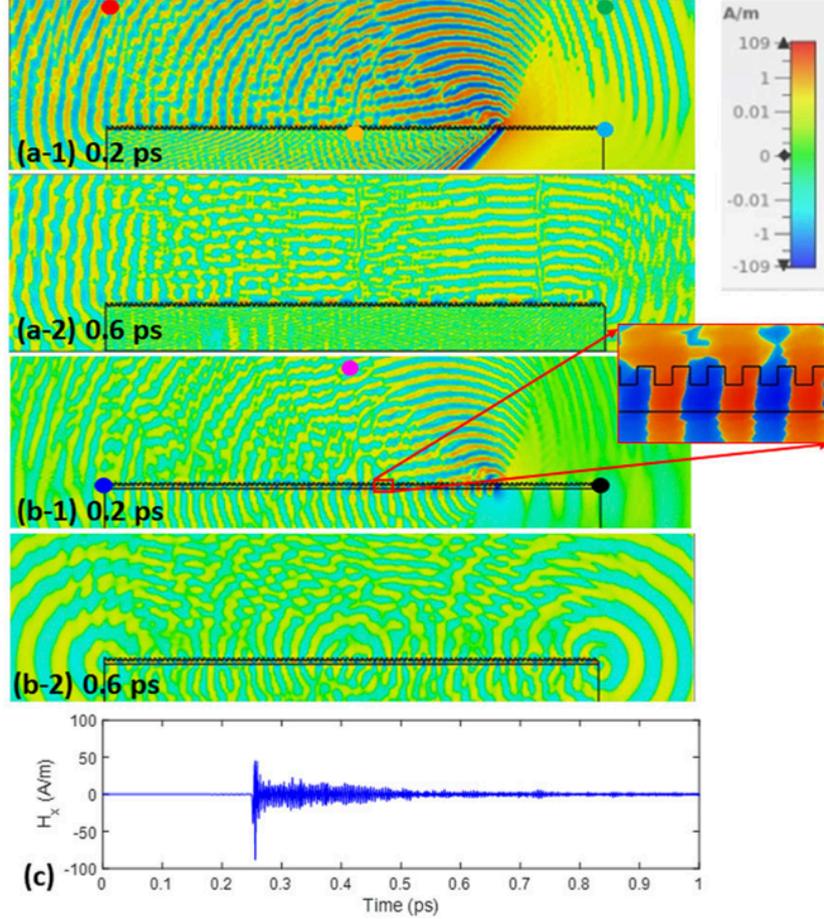
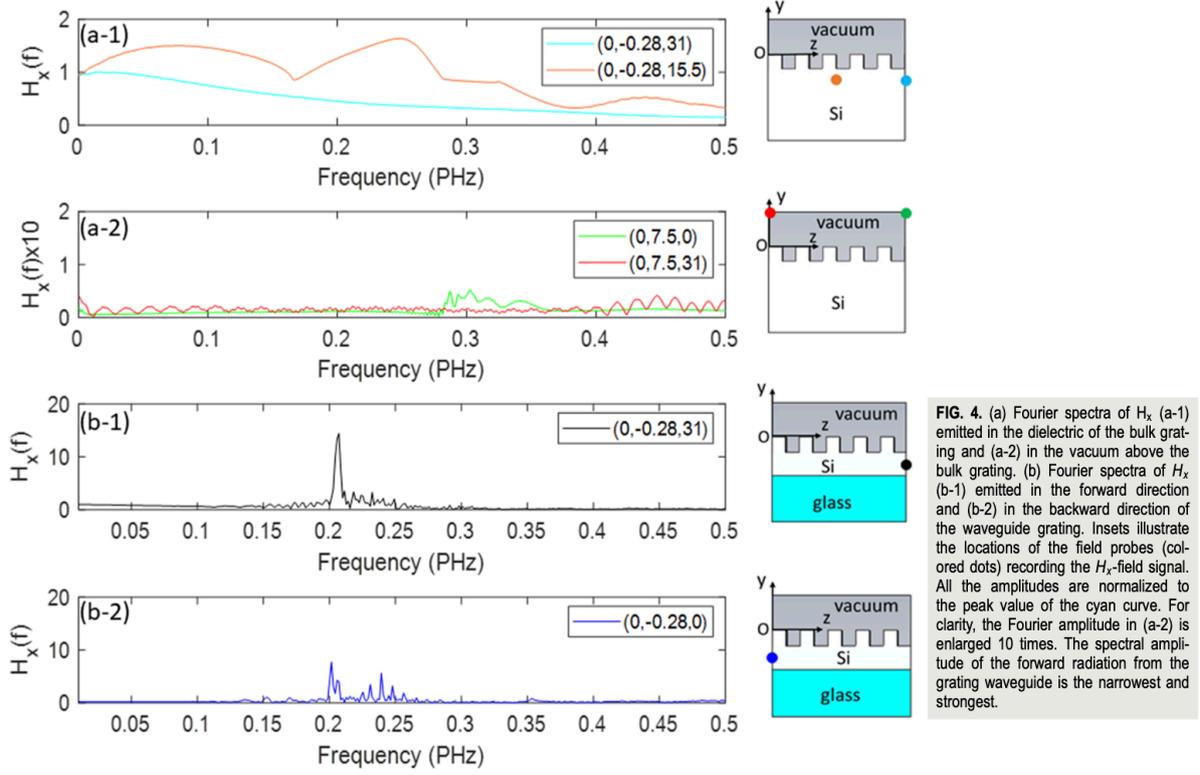


FIG. 3. Single-electron excited TM (H_x) field patterns calculated by CST for (a) a bulk grating with $t_f = \infty$ and (b) a waveguide grating with $t_f = 240$ nm when the electron is still in the grating at 0.2 ps and has left the grating at 0.6 ps. Colored dots are field probes recording the signals in Fig. 4. In (a), the electron generates scattered Cherenkov radiation and Smith–Purcell radiation. In (b), the electron excites strongly guided radiation and the stored quasi-coherent radiation emits from the waveguide output. Inset for (b-1): Guided Bragg-mode field satisfying the Bragg condition in Eq. (8). (c) Ring-down of the H_x field from the downstream waveguide output for (b-2).

此外，这篇论文还讨论了辐射输出场的频谱形态，参考 Fig. 4。对 (a-2) 来说，即对应 Smith-Purcell 辐射。对 (b-1) 来说，辐射场强度最大，且频谱集中在 0.2 PHz 附近，与理论预期一致。对 (b-2)，这篇论文 Section IV 后半部有些讨论，是由于

在介质波导结构内的 Cherenkov 辐射穿透到真空，形成几个对应不同角度有不同频率的辐射场，即 Smith-Purcell 辐射。



Section IV 末尾给出关于能量转换效率的估算，大致为 4×10^{-4} 。这是 50-keV 单电子的能量转换效率。