

硬 X 射线自由电子激光：同步辐射光与激光优势之积

作者 谢尘竹¹

(1. 东北大学 理学院 应用物理系 1601 班, 沈阳 110819)

Abstract : Light source is a sharp tool to promote the development of human civilization. Every progress of light source greatly enhances people's ability to understand and change the unknown world and strongly promotes the development of science and technology. So far, human exploration of light has experienced several epoch-making great strides, such as visible light, X-ray, laser, the first three generations of synchrotron radiation light, and the fourth generation of synchrotron radiation light, namely Free-Electron Laser (FEL). In these light sources, the conventional laser has good coherence, but its wavelength is difficult to further advance to the short-wave band, so its brightness is limited; while the synchrotron radiation light has a slightly poor coherence, but good spectral continuity, and the band extends to the ultraviolet to the X-ray range, so the synchrotron radiation in the hard X-ray band has a very high brightness, which can be called the brightest light source. Hard X-ray FEL combines the advantages of high brightness of synchrotron radiation and high coherence of laser. It opens up a new field for the frontier research of physics, chemistry, biology, materials and other disciplines, and becomes a research tool to achieve scientific breakthroughs and technological innovation.

Key words: HXFEL; FEL; Synchrotron radiation light; Laser

摘 要：光源是推动人类文明发展的利器，光源的每一次进步都极大地增强了人们认识和改变未知世界的能力并有力地推动了科学技术的发展。到目前为止，人类对光的探索经历了可见光、X 射线、激光、前三代同步辐射光、第四代同步辐射光，即自由电子激光(Free-Electron Laser, 简称 FEL)，等几次跨时代的革命。在这些光源中，常规激光相干性好，但其波长很难向短波段进一步推进，以至其亮度受到限制；而同步辐射光则相干性稍差、但光谱连续性好，波段一直延伸到紫外直到 x 射线范围内，因此硬 X 射线波段的同步辐射光亮度极高，堪称最亮的光源。硬 X 射线自由电子激光，则综合了同步辐射光的高亮度和激光的高相干性两大突出优势，为物理、化学、生物、材料等学科前沿研究开辟了全新的领域，成为实现科学突破与技术创新的研究利器。

关键词：硬 X 射线自由电子激光；自由电子激光；同步辐射；激光。

1. 引言

17 世纪初人类发明了望远镜和显微镜，利用电磁波中的可见光部分（波长 400~760 nm），使认知的触角延伸到了极广的宇宙和极小的微观世界，为人类认识物质世界的起源和演化打开了大门。

19 世纪末人类发现了 X 射线、发明了 X 光机，从此认知世界的视野扩展至肉眼无法看到的物质内部和原子分子等微观世界，X 射线的诊断和应用以及治疗技术也得到了持续不断的发展。

但是，那时 X 射线光源的亮度和相干性还十分有限，这在很大程度上成为了限制其在科学研究上实现更广泛应用的瓶颈。

20 世纪 60 年代人类发明了激光，一种前所未有的高亮度、全相干的光源。半个多世纪以来，激光广泛应用在人类社会的各个方面，并且在科学前沿研究上发挥了巨大的促进作用，大大提高了实验观测的时间和空间分辨率。

然而，由于受到放大介质的限制，常规激光却很难向短波长的真空紫外和 X 射线的波段推进，亮度无法进一步提高。

19 世纪末，经典电磁理论已预言相对论电子在改变运动方向时会沿切线方向辐射电磁波。

20 世纪中叶(1947 年)，人们在美国 GE 公司的一台 70 MeV 同步加速器上观察到了这种电磁辐射，也因此称作同步辐射。

在过去的几十年间，第三代同步辐射光源装置一直是产生高强度 X 射线的最佳选择。然而同步辐射并非激光，不具备相干性；若要产生激光，则需要电子聚集在间隔为辐射波长的相位上，通过波荡器来产生相干射线。

但由于向短波方向发展在技术上存在困难，早期建成的自由电子激光器主要工作在远红外与红外区，因此 FEL 虽将激光优势融入了同步辐射光中，但同步辐射光的亮度却大打折扣。随着技术的不断发展，特别是加速器技术上的进步，FEL 已向短波（真紫外、软 X 射线、硬 X 射线）方向推动，直到 2005 年，德国 FLASH 装置在极紫外到软 X 射线波段 of FEL 出光并开始用户实验，标志着人类已经进入了 XFEL（X-ray Free-Electron Laser）时代，且 FEL 技术已过渡到 SXFEL（Soft X-ray Free-Electron Laser）阶段；2009 年，美国 SLAC 的 LCLS 装置的顺利出光，宣告 HXFEL（Hard X-ray Free-Electron Laser）时代的到来。

21 世纪初，基于电子直线加速器的 X 射线自由电子激光在美国 SLAC 实验室研制成功，既赋予了激光高亮度，同时又赋予了同步辐射光源高相干性，开辟了 X 射线光源及其应用的全新时代。

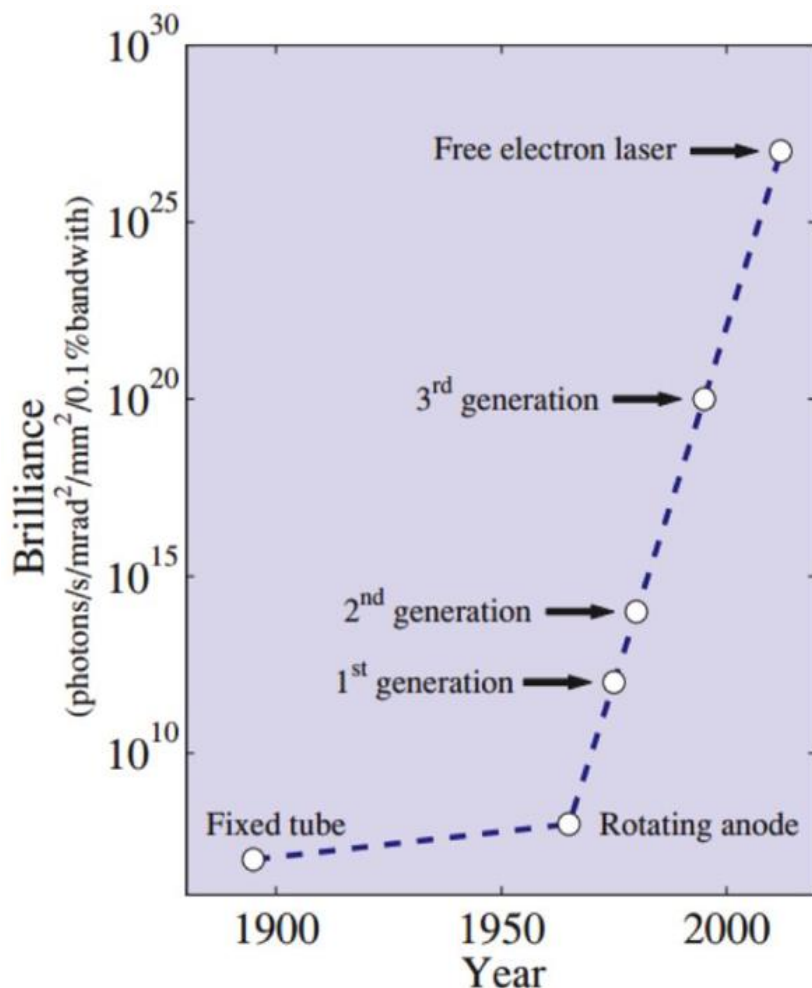


图 1 X 射线强度的变迁史^[1]

Fig. 1 The History of X-ray Intensity Change^[1]

至今，硬 X 射线自由电子激光，已经融合了同步辐射光与激光各自的两大突出优势，以其超高的亮度、超短的脉冲和极好的相干性等同步辐射光源和激光所不可兼得的突出优势，为物理、化学、生命科学、材料科学、能源科学等多学科提供高分辨成像、超快过程探索、先进结构解析等尖端研究手段，形成独具特色、多学科交叉的先进科学研究平台。

2. 自由电子激光(FEL)的发展历史

2.1 同步辐射光及其所附属的大科学装置

2.1.1 同步辐射光源

同步辐射光源是产生同步辐射光以满足研究与应用的大科学装置，包括注入器、储存环和光束线站三部分：注入器产生电子，并将电子加速到所需额定能量，再引入储存环；储存环保持电子以额定能量在其中稳定回转运动并发出同步辐射光；光束线站将光引入相关实验站进行实验和应用^[2]。

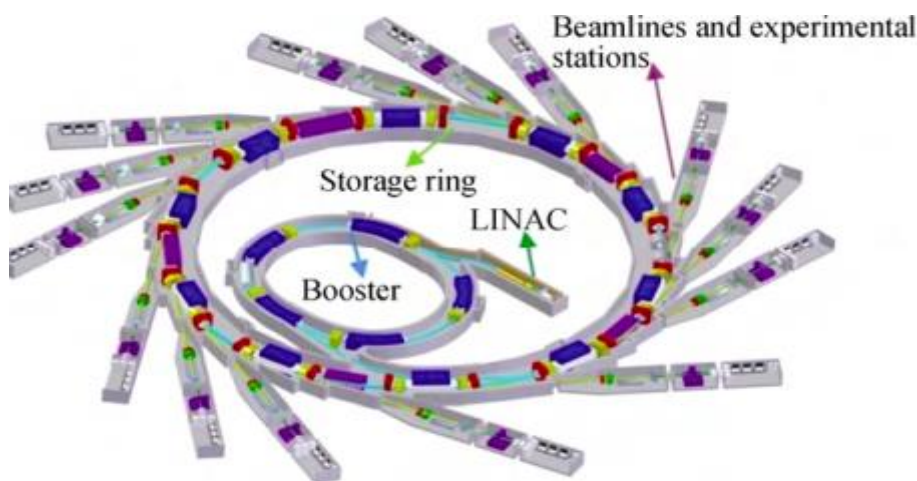


图 2 上海同步辐射光源(SSRF)布局图^[2]

Fig. 2 Layout of SSRF for China^[2]

同步辐射装置的设计建造经历了 4 代：北京正负电子对撞机(BEPC)里的同步辐射光源(BSRF)是典型的第一代光源，设计上主要考虑的是优化对撞实验，不是为了优化同步辐射，国外同类型的还有康奈尔大学的 CHESS；第二代光源就是专门地用于同步辐射实验，安装有部分扭摆器(Wiggler: 即以 N 极+S 极+N 极…循环排列的磁铁组)，代表光源有合肥光源、日本的光子工厂；第三代光源除了扭摆器外，还安装有更多的波荡器(Undulator)，发出的光更强，相干性更好，代表装置有上海光源(SSRF)、台湾光源、美国芝加哥的高能光源(Advanced Photon Source, APS)、欧洲同步辐射装置、日本的超级环 8(Spring-8)。

第四代光源包括：怀柔的北京光源、上海的 X 射线自由电子激光装置，均已于 2018 年动工开建。虽然后者没有储能环，前者有储能环，但后者仍然是进展最快、最具竞争力的实现方案。

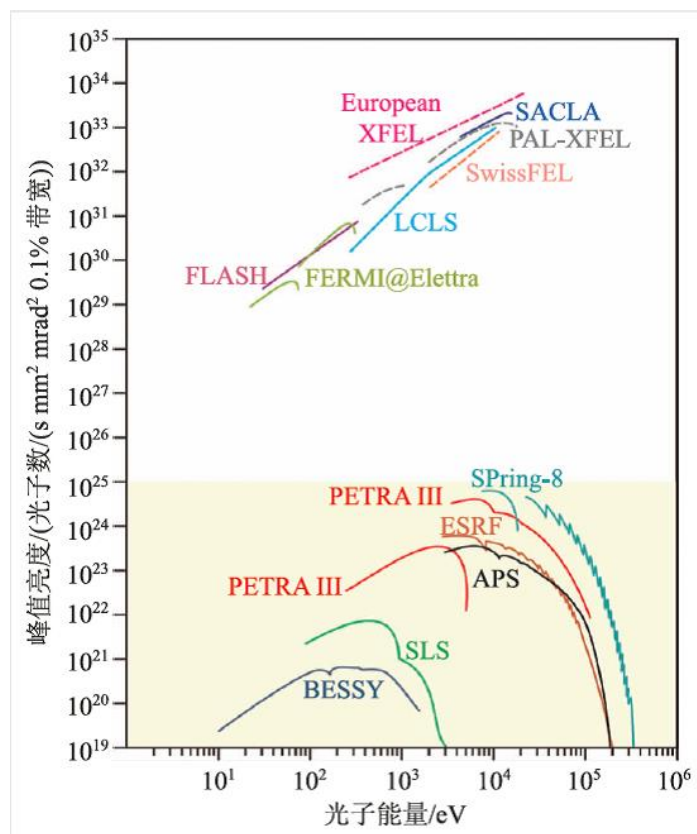


图3 国际上一些主要 XFEL(上方的无阴影部分)与第三代同步辐射光源(下方的有阴影部分)的峰值亮度比较。XFEL 的峰值亮度比第三代同步辐射光源高 10 个量级左右(其中实线为已出光的光源,虚线为正在设计和建造中的光源)^[3]

2.1.2 同步辐射

同步辐射是速度接近光速带电粒子在磁场中沿弧形轨道运动时,沿切线发出的电磁辐射光,最初在同步加速器上观察到,又被称为同步辐射(图 4)^[4]。

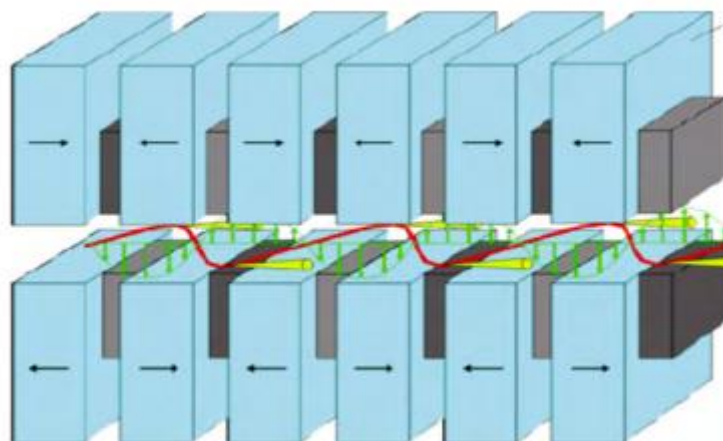


图4 曲线切线方向有同步辐射光输出^[5]

Fig. 4 Synchrotron radiation light^[5]

最初同步辐射并不受高能物理学家欢迎，因其损耗加速器能量和损害加速器部件、阻碍了加速器粒子能量的提高，所以被科学家看作一种需要消除的副作用。但人们很快发现同步辐射是从远红外到 X 波段范围连续脉冲光源，具有高强度、高准直、高度极化和特性可控等优异性能，可用它开展其它光源无法实现的许多前沿科学技术研究。

同步辐射具有天然准直、白谱和偏振三大特性。一个电子在轨道某一点所辐射的光锥的张角约为电子能量因子 γ 的倒数。弯铁同步辐射谱为宽广平滑连续谱，其最短可用波长与电子能量的三次方成正比，与轨道曲率半径成反比。同步辐射在轨道平面内是线偏振的，偏离轨道平面是椭圆偏振的。

一. Undulator 自发辐射

波荡器(undulator)由沿一直线排列的一系列 N 极和 S 极交替的磁铁阵列所构成(图 5)，磁场方向垂直于轴线并沿轴线周期性交替变化，磁场沿轴线的一、二次积分值为零。电子在 undulator 中的最大偏转角 $\alpha = \frac{K}{\gamma}$ ，K 为磁偏转参数， $K = 0.934 B_0(T) \lambda_0(\text{cm})$ ， B_0 为轴线上的峰值场强， λ_0 为磁周期长度。

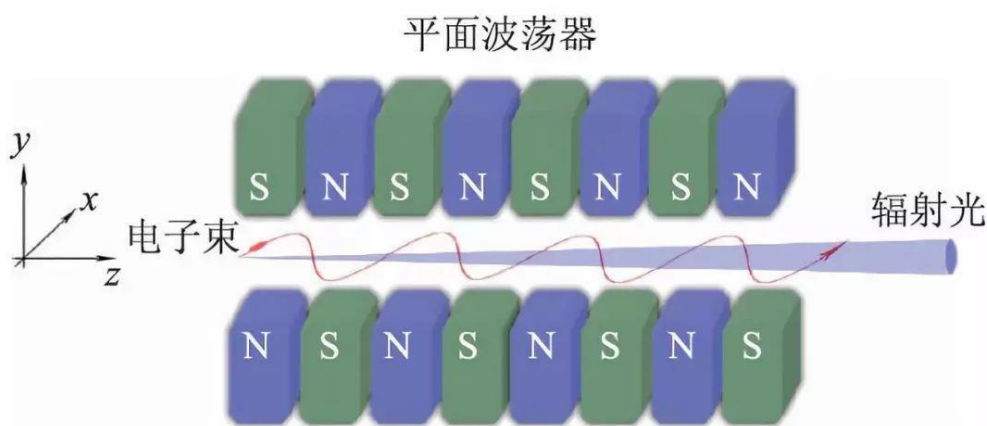


图 5 电子束在波荡器中运动产生相干辐射

Fig. 5 Coherent radiation generated by electron beam moving in an undulator

一般地，undulator 的 $K \leq 1$ ，因此 $\alpha = \frac{K}{\gamma} \leq \frac{1}{\gamma}$ ，因此一个电子在各极的同步辐射都落在单电子同步辐射的立体角内。如果电子在一个磁极处发光并走过一个磁周期后，落后于它在上个磁极处所发光的距离正好等于所发光中某个波长光的波长或波长的整数倍，则每个电子本身在各磁周期中所发射的这些波长的同步辐射相干加强，其他波长的辐射削弱，辐射谱不再是同步辐射谱，而变为若干孤立的峰，即 undulator 辐射。

一般地，当磁周期数 N_0 很大时，undulator 的辐射远比弯铁同步辐射强。由于各个电子的辐射互不相干，undulator 辐射强度只与电子数目 N_0 (一般 $N_0 \geq 10^{10}$) 成正比。电子单独通过 undulator 时所发射的这种辐射称为 undulator 自发辐射，它是部分相干的。

二. 自由电子激光(FEL)

如果电子束通过 undulator 时还有光场相伴，且光的波长满足 FEL 共振公式(图 5)，则 undulator 产生的磁场将使电子产生横向运动，而光的电场也是横向的，于是在 undulator 的磁场和光场的混合场作用下，电子束的速度受到调制，不同速度的电子走过一段路程后，便以光波长为间隔发生群聚。群聚后的电子都具有相同相位。

$$\lambda_{\text{FEL}} = \frac{\lambda_u}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K_u^2}{2} \right)$$

$$K_u = 0.934 B_u \lambda_u$$

图 6 自由电子激光的波长与电子束能量和波荡器参数的关系

如果电子束的发射度又足够小，所有电子通过 undulator 时的辐射便相干，发出受激辐射，即 FEI^[6]。受激辐射时，每个电子的辐射强度大大增加，总辐射强度与电子数目的平方 N_0^2 成正比，因此自由电子激光远比 undulator 辐射强，而且是完全相干的。

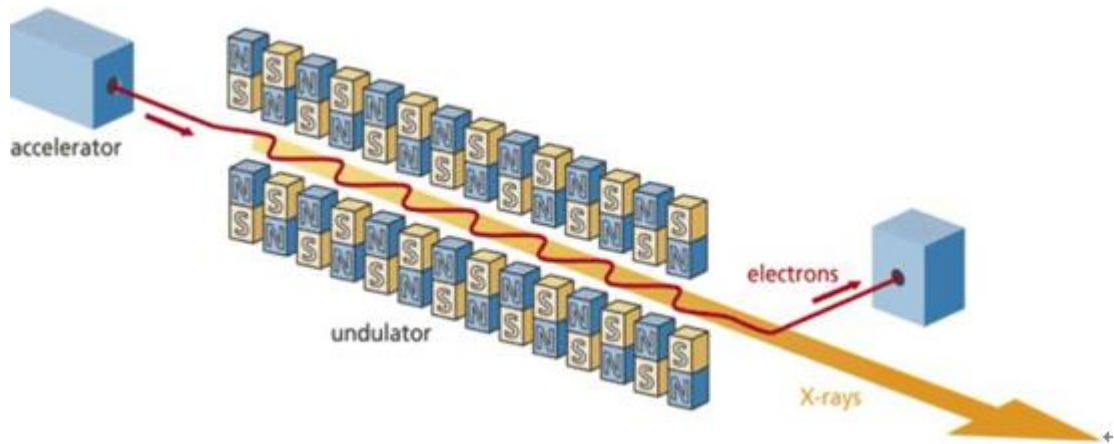


图 7 XFEL 的产生机理示意图^[7]

Fig. 7 The process of generating XFEL^[7]

从弯铁同步辐射到 undulator 辐射，再到 FEI，辐射强度越来越高，相干性越来越好。这一发展过程从很大程度上决定了同步辐射光源的发展道路。undulator 辐射和 FEL 源于同步辐射而又不同于同步辐射，所以由他们三者构成的光源可以合称为同步辐射。

2.2 自由电子激光(FEL)的分类

一. 振荡器型 FEI

如果电子束的流强不够高、体密度不够大、undulator 也不够长，电子束团一次通过 undulator 的辐射不够强，不足以使电子束本身群聚，则可以在 undulator 两端加反射镜构成光学谐振腔，把前面电子束发出的辐射经过反射后作用于后面的电子束，促成群聚。这样光在腔中来回振荡，逐次累积，变得很强，很后面的电子束便可以很好的群聚，发出很强的辐射，直至饱和。这种 FEL 称为振荡器型 FEL。它是低增益的 FEL，一般每次通过的增益小于 50%。

如图 8 所示，其波荡器被放置于光学谐振腔之中，依靠光学谐振腔使返回的辐射光场与电子束相互作用，光场经多次放大到足够的强度后使电子束产生群聚，进而产生受激辐射并最终达到饱和输出。

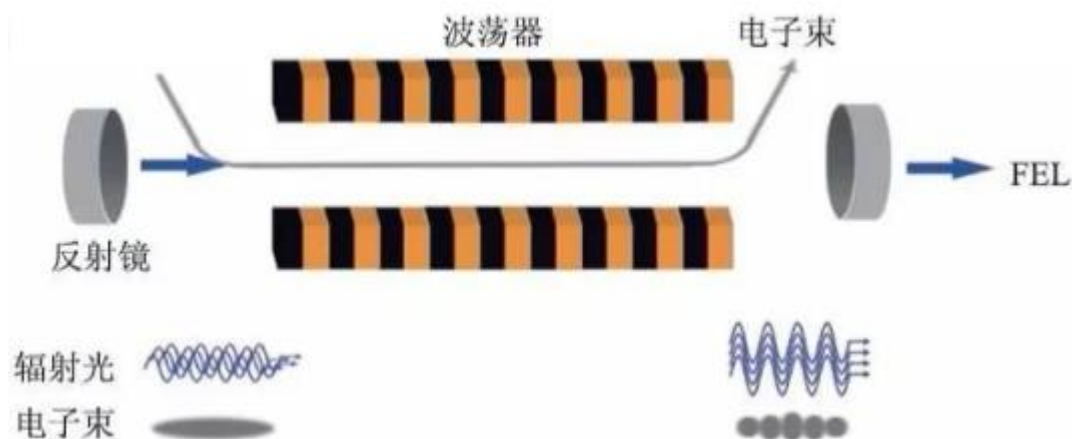


图 8 振荡器型 FEL

二. 自放大自发辐射(SASE)型 FEL

它依靠自发辐射“噪声”启动。发射度接近衍射限的电子束进入 undulator 后发出的自发辐射光场与 undulator 磁场一起使电子束本身群聚，群聚后的电子束发出更强的相干辐射，电子束便受到更强的群聚，如此继续，最后，电子束便被很好的群聚起来。群聚后的电子发出很强的受激辐射，如果电子束流很强，体密度很高，能散度很小，受激辐射功率便沿行程指数增加，即高增益。如果 undulator 周期数又足够多，辐射功率便很快达到饱和。这等于自发辐射自己得到了放大，所以称为自放大自发辐射型(self-amplified spontaneous emission, 简称 SASE)FEI。

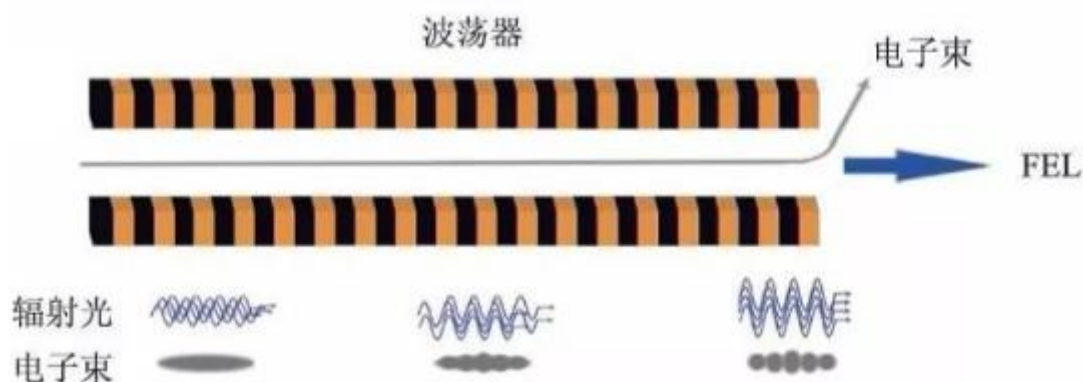


图 9 自放大自发辐射型 FEL

三. 高增益相干谐波(HGHG)型 FEI

它依靠外入射的种子激光启动。它所使用的不是 undulator，而是 undulator 的一种变种光学速调管。光学速调管由一个长周期的 undulator、一个短周期的 undulator 和其间插入的一个强磁场色散段组成。第一个 undulator 称为调制段，第二个 undulator 称为辐射段。

当电子束和种子激光一起进入调制段时，原本具有相同能量(速度)的电子的能量(速度)受到调制。速度变得不同了电子进入色散段后，慢电子走的路程长，快电子走的路程短，离开色散段时，电子便以种子激光波长为间隔群聚起来。群聚后的电子在辐射段里发出受激辐射。可以把辐射段设计得与种子激光的谐波共振，从而把所得到的自由电子激光推向短波长。这称为相干谐波型(Harmonic generation 或简称为 HG)FEI。如果电子束流很强，体密度很高，能散度和发射度很小，电子在辐射段

里所发出的受激辐射功率便沿行程指数增加，即高增益。

如果辐射段周期数又足够多，辐射功率便很快达到饱和。这便称为高增益相干谐波(high-gain harmonic generation, 简称 HGHG)型 FEI，属于外种子型 FEI，是对它的在光谱范围上的拓展。

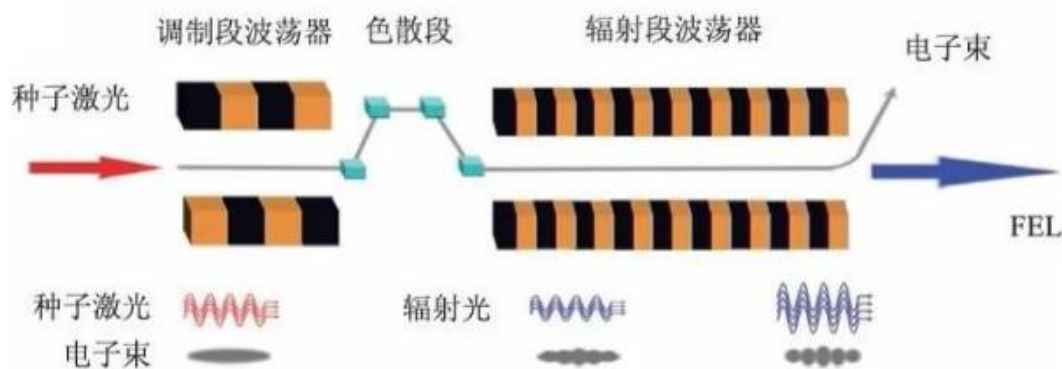


图 10 高增益相干谐波型 FEL

2.3 三种 FEL 的比较

一. 振荡器型 FEI

目前振荡器型 FEL 多用于 THz 和远红外波段，在真空紫外及更短的波长范围，由于缺乏合适的反射材料，振荡器型 FEL 难以工作。

优点：高度空间相干和时间相干，中心波长、强度和光斑位置高度稳定。

缺点：由于使用反射镜，不仅复杂，而且短波长反射率低，镜面易损伤，只能工作于 μV 波段。目前达到的最短波长为 212nm。

改善方案：近些年来，随着加速器技术和晶体反射材料的发展，在硬 X 射线波段实现振荡器型 FEL(XFELO)成为了可能，未来 XFELO 将有可能为用户提供横向纵向全相干、稳定的 X 射线自由电子激光。

二. SASE 型 FEL

现今高增益 FEL 装置的主流方案。

优点：输出波长连续可调、结构相对简单，只需要将电子束通过一个较长的波荡器就可以输出高功率的 FEL。波长可以工作在硬 x 射线波段，不用反射镜，不用种子激光，波长调节方便，运行简洁。

缺点：因依靠“噪声”起动，波动难以控制，中心波长、带宽和强度的稳定性差。

改善方案：用自种子运行机制，将 SASE 的波荡器分为两段，中间用一个 X 射线单色器隔开，电子束在通过第一段波荡器时产生足够强的 SASE 光，但 FEL 还远未达到饱和，此辐射脉冲经过单色器后变成全相干的 X 射线辐射，之后被送入到后面的第二段波荡器中作为种子激光被同一个电子束继续放大直至达到饱和输出。

三. HGHG 型 FEL

HGHG 机制的提出大大拓展了外种子驱动型 FEL 光谱的覆盖范围，是向短波长推进的有效手段，但由于受到电子束能散的限制，单级 HGHG 的谐波转换次数一般为 10 次左右，较适合于产生真空紫外波段的 FEL。

优点：中心波长、带宽、脉冲时间结构和强度高度稳定，带宽窄，光脉冲可以窄至 fs。

缺点：需要种子激光，不仅是多了设备，而且因激光波长的限制，谐波数又不可能太大，向 X 射线波段推进有困难；且在产生超高次谐波时这些运行模式仍面临着电子束品质退化或初始噪声放大的问题。

改善方案：为将 HGHG 进一步向 X 射线波段推进，人们又提出了级联 HGHG 和回声谐波产生 (echo-enabled harmonic generation，简称 EEHG)运行机制，并进行了实验验证。

3. 自由电子激光(FEL)的发展现状

3.1 国际 FEL 装置建设情况

图 11 给出了目前国际上运行的、在建的和计划建造的 X 射线 FEL 装置，这些装置主要集中在北美、欧洲和东亚；表 1 给出了这些装置的主要参数；图 12 给出了这些装置的鸟瞰图

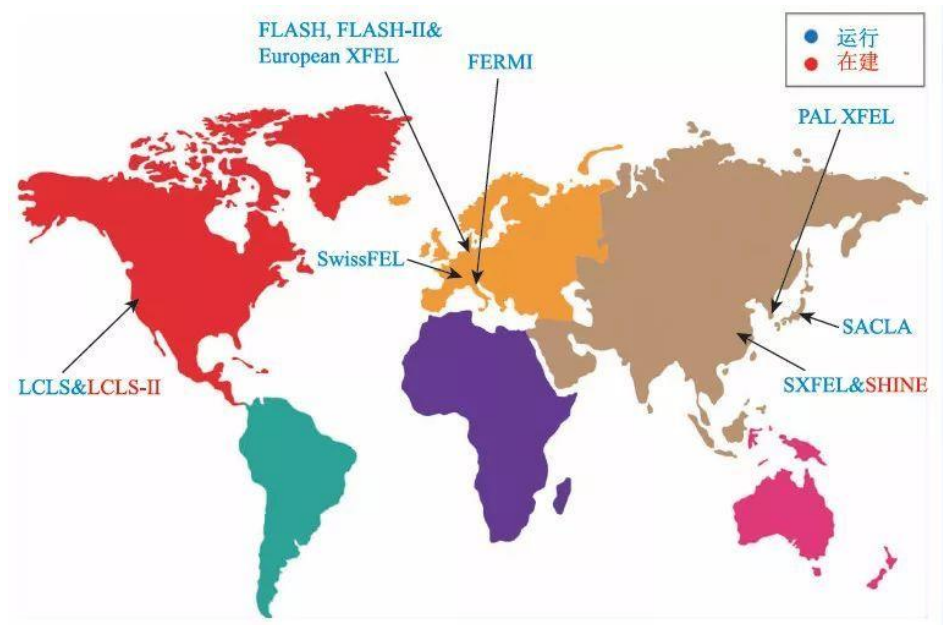


图 11 国际上的 X 射线 FEL 装置分布

装置名称	加速器类型	电子束能量/GeV	光子能量范围/keV
LCLS	常温、S 波段	14.3	1—15
LCLS-II	超导、L 波段	4	0.2—5
FLASH	超导、L 波段	1.25	0.014—0.3
Eu XFEL	超导、L 波段	17.5	8.4—30
SACLA	常温、C 波段	8	0.44—20
FERMI	常温、S 波段	1.5	0.0124—0.3
PAL XFEL	常温、S 波段	10	0.124—12.4
SwissFEL	常温、C 波段	5.8	0.177—12.4
SXFEL	常温、C 波段	1.5	0.1—0.6
SHINE	超导、L 波段	8	0.4—25

表 1 国际上 X 射线 FEL 装置的主要参数

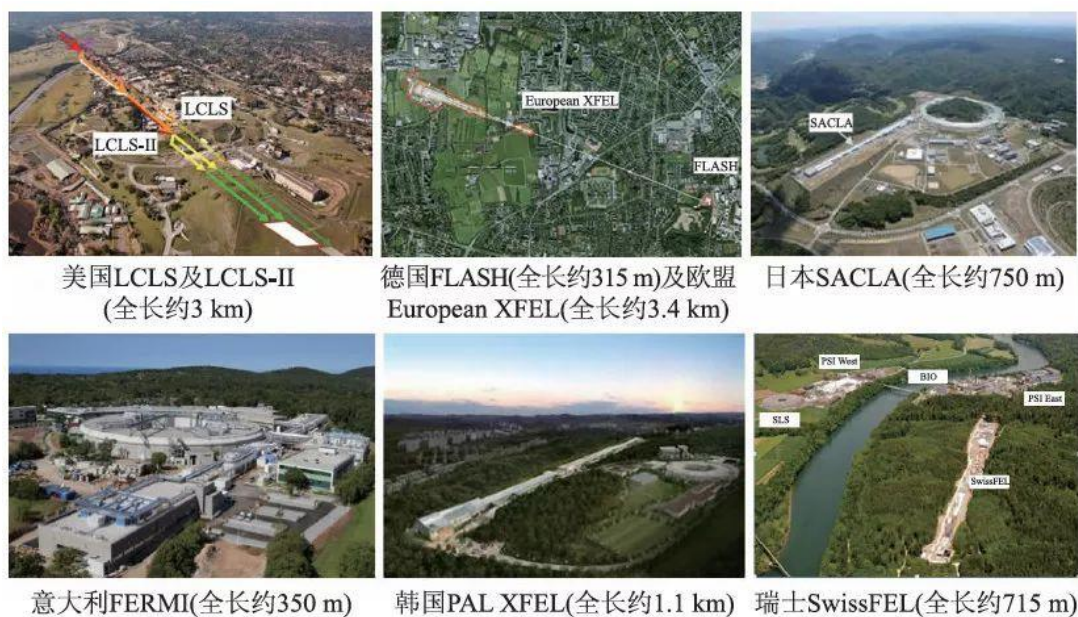


图 12 国际上的 X 射线 FEL 装置及规模

可以看到自由电子激光通常与第三代同步辐射放置于同一园区，从而构成光子科学研究中心。

3.2 中国 XFEL 的发展现状

2018 年 4 月 27 日，硬 X 射线自由电子激光装置在上海启动建设，国内投资最大科技基础设施项目开工。该 HXFEL 选址在上海张江综合性国家科学中心核心区域，装置总长约 3.1 公里，将建设埋深 29 米的地下隧道，包含超导直线加速器隧道、波荡器隧道、光束线隧道等 10 条隧道及 5 个工作井。



图 13 硬 X 射线自由电子激光装置进入全面建设阶段



图 14 上海光源旁，新一代光源——X 射线自由电子激光装置正在建设

未来，它将与已有的上海同步辐射光源、软 X 射线自由电子激光装置、超强超短激光实验装置等一起，形成全球规模最大、种类最全、综合能力最强的光子大科学设施群。

3. 总结与展望

X 射线 FEL 以其超高的亮度、超短的脉冲和极好的相干性等同步辐射光源所不具备的突出优势，在物理、化学、生物、材料等前沿领域有非常重要的应用前景。

自美国 LCLS 开启 X 射线自由电子激光的时代以来，XFEL 已经进入了快速发展的历史阶段，一系列物理、化学、生物、材料科学领域的前沿研究成果不断涌现，已带来了诸多革命性的影响。

XFEL 的发展已经从原理验证、方法学探索阶段走向前沿科学突破的快速发展阶段，有望在解决国家战略需求的能源、环境、健康与新材料发现等前沿领域发挥不可替代的重要作用，成为实现科学突破与技术创新的研究利器。

参考文献

- [1] P. Emma , R. Akre, et al. Nat Photonics, 4: 641 (2010).
- [2] <http://ssrf.sinap.ac.cn/>
- [3] Philip H. Bucksbaum, Nora Berrah. Physics Today, 2015, (7): 26.
- [4] 尹 真, 编著. 电动力学. 北京: 科学出版社, 2012: 197-209.
- [5] HALBACH K. Physical and optical Properties of rare earth cobalt magnets. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1981, 87: 09-117.
- [6] ZHANG LING-YI, ZHUANG JIE-JIA, ZHAO KUI, et al. Fourth-generation light sources. High Power Laser and Particle Beams, 2001, 13(1): 51-55.
- [7] Tetsuya Ishikawa, et al. Nat Photonics, 6: 540 (2012).
- [8] Zhao Z, Wang D, Gu Q et al. Applied Sciences, 2017, 7(6): 607.
- [9] Zhao Z T, Wang D. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2016, 63(2): 930.

- [10] Wang H L, Yu Y, Chang Y et al. The Journal of Chemical Physics, 2018, 148: 124301.
- [11] Feng C et al. Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams, 2014, 17(7): 070701.
- [12] Feng C, Deng H, Wang D et al. New Journal of Physics, 2014, 16(4): 043021.
- [13] Deng H, Feng C. Phys. Rev. Lett., 2013, 111(8): 084801.
- [14] Zhao Z T, Feng C, Zhang K Q. Nuclear Science and Techniques, 2017, 28(8): 117.
- [15] Prof. Li Si-ming , SongY.L , Chiang N., Displacement , Housing Conditions and Residential Satisfaction: An Analysis of Shanghai Residents [J], Occasional Paper Series, 2007 , No.78 .
- [16] Zhao Z, Feng C, Chen J et al. Science Bulletin, 2016, 61(9): 720.
- [17] Feng C, Zhao Z T. Chinese Science Bulletin, 2010, 55(3): 221.
- [18] Liu B, Li W B, Chen J H et al. Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams, 2013, 16(2): 020704.
- [19] Zhao Z T et al. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A, 2004, 393: 96.
- [20] Allaria E et al. Nat. Commun., 2013, 4: 2476.
- [21] Lutman AA et al. Phys. Rev. Lett., 2013, 110(13): 134801.
- [22] Yu L H, Johnson E, Li D et al. Phys. Rev. E, 1994, 49(5): 4480.
- [23] Emma P, Bane K, Cornacchia M et al. Phys. Rev. Lett., 2004, 92: 074801.