

# 电磁辐射与加速器束流动力学导论

Introduction to Accelerator Beams, Collective Dynamics,  
Electromagnetic Radiation and Free-electron Lasers

作者：蔡承颖 (Cheng-Ying Tsai, C.-Y. Tsai)

## 特别声明

此笔记/讲义非最终版，内容可能存在笔误、谬误，仍在迭代修改中。此讲义不定期更新。

# 第十四章 兆伏、超快电子束动力学

## 内容提要

- 泵浦-探测基本概念
- MeV UED 设计参数
- 超快电子成像平台组成单元
- 空间电荷束包络方程

作为此讲义第三部分，此专题介绍目前正在华中科技大学<sup>1</sup>开展的兆伏、飞秒电子成像装置，包含泵浦-探测的基本原理、超快电子成像平台概述及平台各个子系统的定性描述。这一章最后介绍一种描述空间电荷动力学的束包络方程 (beam envelope equation)。此讲义仅定性介绍，未必全面、详实。更全面、完整的讨论，可参考上海交通大学出版社的“核能与核技术出版工程”- 先进粒子加速器系列，由向导教授编著的“加速器超快电子探针技术及其应用”一书。

## 14.0 问答预览

### 1. 什么是泵浦-探测技术?

⇒ 泵浦-探测技术是一种用于研究超快时间尺度下材料和分子动态过程的实验方法，通常用于探测物质中的电子、振动、自旋等动力学过程。它广泛应用于化学、物理、材料科学等领域，比如：光激发、电荷转移暂态过程、能量转移交互作用等。

### 2. 与 X 射线相比，为什么电子束更适合作为 UED 的探测源?

⇒ 电子束与物质的相互作用主要是通过库仑力与原子核和电子发生散射。电子的散射截面比 X 射线大 5 至 6 个数量级，因此，在相同条件下，电子束可以提供更强的散射信号。由于其较高的散射截面，所需的探测强度较低，因而可以在一定程度上减少样品损伤。相比之下，电子在样品上的能量沉积比 X 射线小  $10^3$  倍，因此对样品的损伤程度较小。

### 3. 什么是电子束的亮度? 如何提高电子束的亮度?

⇒ 电子束的亮度是衡量电子束综合品质的参数，可以用六维、五维或四维亮度来描述。提高电子束的亮度可以通过增加阴极处的加速电场或减小发射电子的速度差异来实现。

### 4. 什么是空间电荷效应? 它对 UED 有哪些影响?

⇒ 空间电荷效应可以视为束团内粒子间的远程库仑斥力导致，随着粒子电荷密度增加的增加而增强。它会导致束团长度拉伸、发射度增加等不利后果，严重影响束流的品质，从而降低探测的时空分辨率。

### 5. 什么是兆伏超快电子衍射 (MeV UED)?

⇒ MeV-UED 是一种使用兆伏能量、飞秒电子束作为探测源的超快电子成像技术。

<sup>1</sup>这一章部分内容受国家自然科学基金重点项目资助，项目名称“空间电荷效应下高亮度超快电子束产生与太赫兹操控理论与技术研究”(12235005)。

6. MeV UED 系统主要由哪些组成单元构成?

⇒ MeV UED 系统主要由激光系统、射频系统、光阴极电子枪、加速腔、传输段、束测元件、样品室和衍射成像系统等组成。

7. 激光系统在 MeV UED 中扮演哪些角色?

⇒ 激光系统在 MeV UED 中主要扮演以下角色:

- 通过光电效应产生电子束;
- 作为泵浦激光束, 激发样品;
- 激发束线过程可能用到的束测元件, 比如: 太赫兹波长结构;
- 用作磁聚焦结构传输线轨迹准直。

8. 射频系统对 MeV UED 的时间分辨率有何影响?

⇒ 射频系统决定了微波电子枪的加速场的稳定性。加速场的稳定性越高, 电子束的能量越稳定, 飞行时间抖动越小, 从而时间分辨率越高。

9. 什么是暗电流? 对 UED 有哪些影响?

⇒ 暗电流是指光阴极无激光照射时, 由热电子及场致电子发射等产生的电流。暗电流会影响真空系统的真空度、阴极表面的光电逸出功、光电子束的性能等。

10. 什么是空间电荷效应的切片束矩阵方法? 它有什么优点?

⇒ 切片束矩阵方法是一种研究空间电荷效应动力学的方法, 通过将束团沿纵向分成多个切片, 分别分析每个切片的动力学过程, 然后将切片的动力学结果综合起来得到整体束团的动力学过程。这种方法可以更好地描述空间电荷效应的动力学, 并且可以应用于非线性部件的分析。

## 14.1 泵浦-探测：一种研究物质结构的技巧

物质由微观粒子，如：原子、电子和分子组成，而其宏观性质则由这些微观粒子的种类、结构和运动状态所决定。也就是说，**物质结构决定了物质特性**。研究微观世界的面向有二：微观结构的空间分布、微观结构的时间分布/演化。这一章将主要聚焦后者。对前者来说，不同的空间尺度有对应的适合的探测工具，整理为下表<sup>2</sup>：

对象	空间尺度 (m)	“探针”能量 (eV)	实验工具
细胞、细菌	$10^{-5} \sim 10^{-7}$	0.1 ~ 10 光子、电磁波	光学显微镜
分子	$10^{-9}$	$10^3$ 光子、电子	电子显微镜、同步辐射等
原子	$10^{-10}$	$10^4$ 光子、中子	同步辐射、散裂中子等
原子核	$10^{-14}$	$> 10^8$ 电子/强子、伽马射线	低中能加速器、宇宙射线等
质子、中子	$10^{-15}$	$> 10^9$ 电子/强子、伽马射线	高能加速器、宇宙射线等
夸克、轻子	$10^{-18}$	$> 10^{12}$ 电子/强子、伽马射线	对撞机、宇宙射线等

研究物质微观空间结构的思路：用微观粒子“撞”未知结构，然后，通过微观粒子被结构散射后的分布特性，反推物质结构。

当物质的微观结构随时间发生动态变化时，相应的宏观性质也会发生变化。因此，研究微观粒子的动力学行为对于理解、应用和控制与物理、化学、生物等宏观物性相关的现象至关重要，这种研究是当前科学的研究的前沿，称“超快科学”(ultrafast science)。

微观粒子运动的一个重要参数是运动的特征时间：

- 分子振动的特征时间约为 100 飞秒 (fs) 量级  $\Rightarrow 1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$
- 价电子 (valence electron)<sup>3</sup> 的特征时间约为 1 fs 量级
- 原子内层电子 (inner shell 或 inner electron) 的特征时间约为 1 阿秒 (as)<sup>4</sup> 量级  $\Rightarrow 1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$

例如，飞秒化学反应取决于原子核在飞秒 (fs) 和皮米 (pm,  $10^{-12} \text{ m}$ ) 的时空尺度上的运动，而电子密度的变化速度达到了阿秒量级。如果我们能够以原子级的时空分辨率来探测这些微观粒子的运动过程，就可以获得一个可视化的四维时空反应进程的“电影”，这将为理解新现象、发现新机制提供前所未有的手段。

二十一世纪后，超快科学的研究领域不断扩展，对物理、化学和材料科学等学科的

<sup>2</sup>此表修改自陈佳洱、张闯著，超级显微镜，科学普及出版社 (2021)。

<sup>3</sup>一个单独的电子或是原子外层壳层中的两个或更多电子之一，表征原子的化学性质。

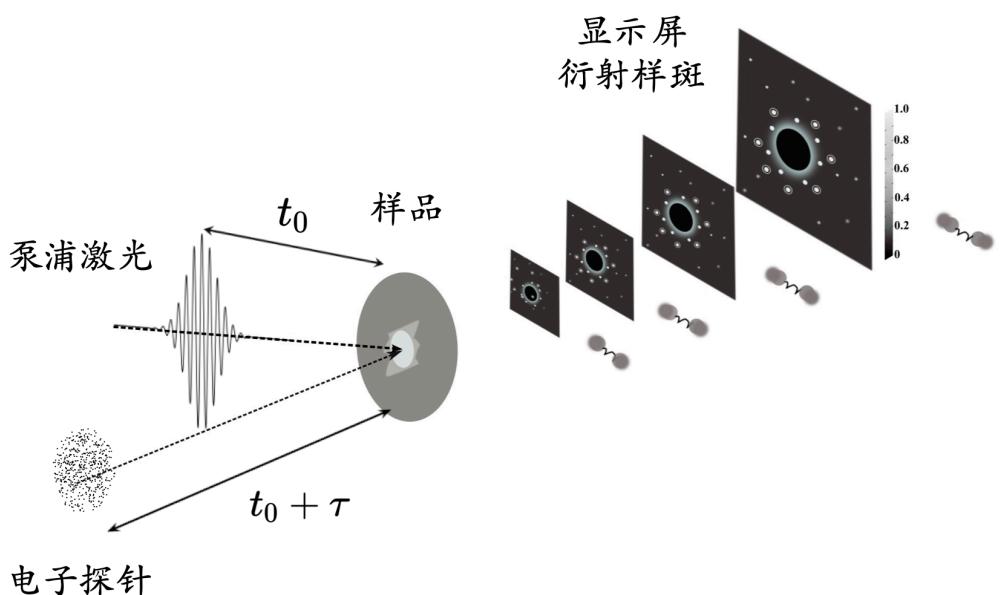
<sup>4</sup>2023 年诺贝尔物理学奖授予 Pierre Agostini、Ferenc Krausz、Anne L’Huillier，为表彰研究物质中电子动力学而产生阿秒光脉冲的实验方法。1 as 比起 1 s 相当于 1 s 比起宇宙年龄 (137 亿年)。

发展产生了深远影响。随着超快探测理论和技术的发展，现在可以观测到以前未曾见过的物质状态转换的瞬态过程。为更好地理解未知世界中的自然现象，需要更高的时空分辨率，以获取更准确的物质时空演化信息，推动超快探测方法和技术的不断突破。超快探测将微观结构与动力学联系起来，为科学突破创造了巨大机遇，因此，超快科学研究已成为各个国家科研领域竞相争夺的热门领域之一。

探测技术中最普遍使用的技术称泵浦-探测技术 (pump-probe technique)，参考图 14.1。泵浦-探测技术是一种用于研究超快时间尺度下材料和分子动态过程的实验方法。它通常用于探测物质中的电子、振动、自旋等动力学过程，具体来说，pump-probe 技术通常包括以下几个关键步骤：

- 激发、泵浦 (pump)：在 pump-probe 实验中，首先使用一个非常短脉冲的激光或自由电子束来激发样品。这个激发脉冲通常能量密度较高，能够将样品中的电子结构激发到一个激发态，从而改变其性质。
- 探测 (probe)：接下来，使用另一个非常短脉冲的激光脉冲或自由电子束脉冲来探测样品中的电子、振动或自旋等性质。这个探测脉冲的时间延迟可以调整，以便在激发后不同的时间点测量样品的性质。
- 时间延迟调整 (time-delay)：pump 和 probe 脉冲之间的时间延迟非常重要，因为它允许研究者在不同的时间尺度上观察样品的动态过程。通过改变时间延迟，可以获取样品在激发后的不同时间点的信息。
- 信号检测：pump 和 probe 激光的交互作用将导致样品发生各种变化，如：吸收、发射、折射率变化等。这些变化可以通过适当的检测器来测量和记录，通常以时间为自变量。从这些信号中，研究者可以获取关于样品中不同动力学过程的信息。

Pump-probe 技术的关键在于时间分辨率，能够观察到纳秒、皮秒甚至飞秒时间尺度下的过程。这种技术在化学、物理、材料科学等领域中得到广泛应用，比如用于研究光激发、电荷转移暂态过程、能量转移交互作用等过程，有助于揭示材料的动力学特性和响应。



**图 14.1：**基于超快电子成像的泵浦-探测测量示意图。时间分辨率主要由电子束特性决定。信号检测为一帧帧不同延迟时刻  $\tau$  记录的衍射成像与侦测到光激发导致的特性改变的强度。对激光泵浦、电子探针情况，一般通过调整激光(而不是电子束)到达时间扫描不同的延时  $\tau$ 。

## 14.2 超快电子成像平台概述

这一节的超快电子成像平台主要介绍超快电子衍射 (ultrafast electron diffraction, UED)。

超快 X 射线衍射 (ultrafast x-ray diffraction, UXD) 是当前最主要的超快科学手段之一。为提高探测的空间分辨率，需要更短波长的 X 射线，这是推动第 10 章介绍的 X 射线自由电子激光 (x-ray free-electron laser, XFEL) 装置发展的一个重要驱动因素。基于 XFEL 的 UXD 设备通常规模庞大，是国家级重大基础设施，其建设和运行成本极高，因此每个用户的实验机会与机时 (machine time) 相对有限。基于 XFEL 的 UXD，通常其泵浦源 (pump) 为传统激光，探测源 (probe) 为 XFEL 激光。

与 UXD 相比，UED 采用传统激光为泵浦，而电子束作为“探针”(probe)，为超快科学提供了另一种有力工具。电子与 X 射线的一个根本区别是它们与物质交互作用的机制：作为探针，X 射线的高频时变电磁场使物质原子附近的电子振荡，振荡电子伴随产生辐射；电子束则更倾向于与物质原子中心附近的正电核心产生库仑作用。此外，与 X 射线相比，电子“探针”的一个显著优势在于其电子的物质波波长或德布罗意 (de Broglie) 波长相对短得多。

### 定义 14.1. 电子的物质波波长公式

电子的物质波波长，又称电子的德布罗意波长

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\gamma m_e v} = \frac{h}{m_e v} \sqrt{1 - \beta^2} = \frac{h}{m_e v} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (14.1)$$

其中， $h \approx 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$  为普朗克常数， $m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$  为电子质量。实用公式可写成

$$\lambda [\text{pm}] \approx \frac{2.426}{\sqrt{\gamma^2 - 1}} \quad (14.2)$$

其中， $\gamma = 1 + \frac{E_k [\text{MeV}]}{0.511}$ ， $E_k$  为电子动能。

**注** 对于 100 keV UED，电子的物质波波长约为 3.7 pm；对 3 MeV UED，电子的物质波波长约为 0.36 pm。

以约 1 Å ( $10^{-10} \text{ m}$ ) 的空间分辨率为例，对应的光子能量相当于约 12.4 keV 的 X 射线，而电子只需 0.15 keV 的动能，其表征的物质波波长足以达到 1 Å ( $10^{-10} \text{ m}$ ) 的空间分辨率，这意味着 UED 容易实现更高的空间分辨率。因此，UED 具备在原子的时空尺度上观察分子结构演化过程，捕捉“原子电影”的能力，这是理解非平衡态化学、物理、材料等过程的重要工具。相对于 FEL 装置，UED 设备通常紧凑且成本较低，并且具有以下特性：

1. 电子与样品的相互作用截面积比 X 射线高出 5 至 6 个数量级；
2. 电子在样品上的能量沉积比 X 射线小  $10^3$  倍，因此对样品的损伤程度很小。

此特性使 UED 能够在不破坏样品的情况下获取足够的超快信息，使其非常适用于不可逆过程或生物体系的探测实验，在生命科学的研究中发挥了不可替代的作用。

UED 与 UXD 不是谁取代谁，而是彼此形成互补。

### 14.2.1 浅谈：电子散射、晶体衍射

#### 14.2.1.1 电子散射

作为探针，电子与样品“碰撞”，参考图 14.2，碰撞过程可分为弹性与非弹性。弹性碰撞<sup>5</sup>仅影响探针的运动方向，不改变其能量；非弹性碰撞则涉及电子探针的能量改变。电子作为一种波——物质波，其碰撞过程满足物质波方程，称薛定谔方程 (Schroedinger equation)。当样品中的原子处于静态不随时间改变时，波函数  $\psi$  满足不含时的薛定谔方程 (time-independent Schroedinger equation)，有

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V \right) \psi = E\psi \quad (14.3)$$

其中， $\hbar$  为普朗克常数， $m_e$  为电子静止质量， $E$  为电子总能量， $V = V(\mathbf{r})$  为样品中的原子势能函数。电子散射的过程——散射前、散射后——由此方程决定。散射前、自由电子的物质波函数是给定的，散射后的电子物质波函数将通过求解薛定谔方程得到。散射前电子物质波函数就像平面波，可写成

$$\psi_{\text{in}} = A e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \quad (14.4)$$

其中， $A$  为物质波振幅， $\mathbf{k}_0$  为入射前电子波矢 (波向量)。实际上，样品中包含许多原子，但这里简化起见，先考虑单个原子，合理假设原子的势能函数为球对称，即  $V(\mathbf{r}) = V(r)$ ，则在球坐标系，散射电子物质波函数可写成如下形式

$$\psi_{\text{scattering}} = \frac{A}{R} f(\theta, \phi) e^{ikR} \quad (14.5)$$

其中， $f(\theta, \phi) \propto V(r)$  为弹性散射振幅。称  $|f(\theta, \phi)|^2$  为散射截面 (scattering cross section)<sup>6</sup>，以下将给出  $|f(\theta, \phi)|^2$  的表示式。上式成立条件为当  $R \gg 1$  时，即散射后远离被散射原子处 ( $R = 0$ )。对弹性散射，上式指数中的  $e^{ikR} = e^{ik_0 R}$ 。当考虑样品中包含  $N$  个原子时，通过叠加原理，上式推广后的结果为

$$\psi_{\text{scattering}} = \frac{A}{R} e^{ikR} \sum_{j=1}^N f_j(s) e^{-is \cdot \mathbf{r}_j} \quad (14.6)$$

其中， $\mathbf{s} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$  为散射电子的动量转移 (momentum transfer)。

粗略来看，散射后的波函数  $\psi_{\text{scattering}}$  正比于  $f_j$  的傅里叶变换。

不细究推导过程，关于电子与样品的相互作用截面积，此处给出估算公式。

<sup>5</sup>按定义，弹性碰撞要求两质点在碰撞前后的总动能与总动量守恒。

<sup>6</sup>第一册 §1.19 介绍过电磁辐射场 (波) 的“散射截面”，这里的电子既然被视为物质波，“散射截面”的概念也就自然而然了。

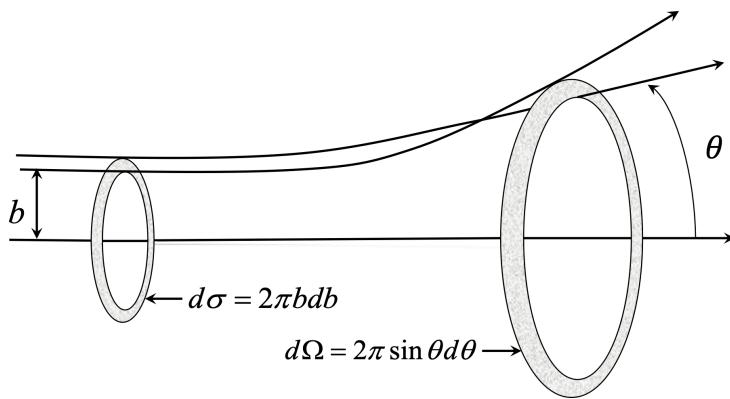


图 14.2: 电子束与样品的微分散射截面与散射角示意图。

### 定理 14.1. 电子微分散射截面公式

参考示意图 14.2, 电子与样品的微分散射截面 (differential scattering cross section, DCS) 可写成

$$D(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} \equiv |f(\theta, \phi)|^2 = \frac{4Z^2}{s^4 a_0^2} \frac{1 - \beta^2 \sin^2(\theta/2)}{1 - \beta^2} [1 - F^2(s)]^2 \quad (14.7)$$

其中,

- $a_0 \approx 0.53 \text{ \AA}$  为波尔半径 (Bohr radius)
- $Z$  为组成样品的原子数
- $s$  为动量转移幅值  $s = |\mathbf{s}| = (4\pi/\lambda) \sin(\theta/2)$
- $F(s) = \sum_i \frac{A_i \alpha_i^2}{s^2 + \alpha_i^2}$

以银原子 ( $\text{Ag}$ ,  $Z = 47$ ) 为例, 有  $A_i = [0.25, 0.62, 0.13]$ 、 $\alpha_i = [15.59, 2.74, 1.14] \text{\AA}^{-1}$ 。微分散射截面的量纲为面积, 与散射角、动量转移、电子动能的关系如图 14.3。

微分散射截面的物理图像: 微分截面积表征有多少电子能在样品的某个方向角的范围内衍射。一般来说, 微分截面积越大越好。

**注** 以上所给为弹性 (微分) 散射截面。总 (微分) 散射截面为弹性 (微分) 散射截面与非弹性 (微分) 散射截面之和。

**注** 细节可参考 D. Filippetto et al., Ultrafast electron diffraction: Visualizing dynamic states of matter, Rev. Mod. Phys. **94**, 045004 (2022). <https://journals.aps.org/rmp/pdf/10.1103/RevModPhys.94.045004>

**注** 以上的系数考虑了库仑屏蔽效应, 对不同原子取值不同, 可参考 F. Salvat, J. D. Martnez, R. Mayol, and J. Parellada, Analytical Dirac-Hartree-Fock-Slater screening function for atoms ( $Z = 1 \sim 92$ ), Phys. Rev. A **36**, 467 (1987). <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevA.36.467>。

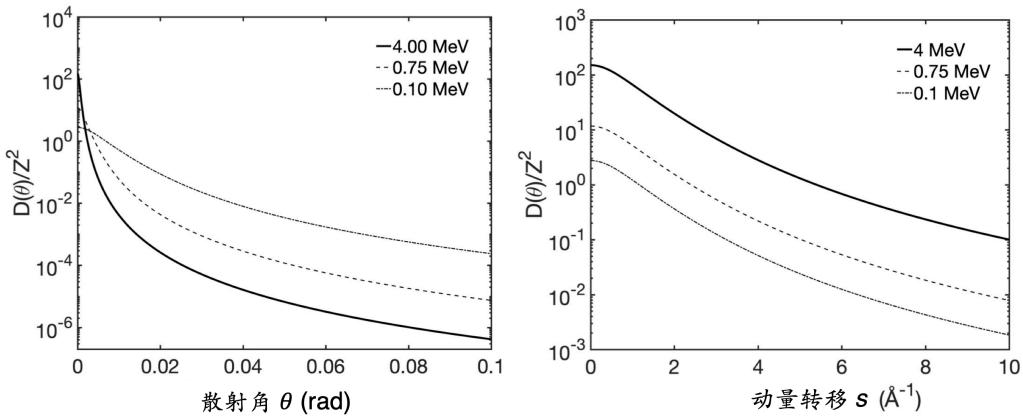


图 14.3: 电子与样品的微分散射截面与散射角、动量转移、电子动能的关系。

### 定义 14.2. 散射截面

由上微分散射截面公式，根据立体角  $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\theta$ ，可以定义两种散射截面：

- 总弹性散射截面 (total elastic cross section): 散射过程发生的有效面积

$$\sigma \equiv 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (14.8)$$

- 动量转移散射截面 (momentum transfer cross section): 提供散射过程的角度依赖关系

$$\sigma_{\text{tr}} \equiv 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (14.9)$$

在不同情况下，两种定义提供关于散射过程的不同信息。

**注** 在核物理和粒子物理领域，截面积常用 barn 为单位， $1 \text{ b} = 10^{-24} \text{ cm}^2$ 。

轰击样品散射后，电子束形成的电流密度可以通过物质波函数  $\psi$  的合成形式得到，有

$$\mathbf{J}_b = -\frac{iq\hbar}{2m_0} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (14.10)$$

其中，\* 为取共轭。略去细节，将前面介绍的散射后的物质波函数  $\psi_{\text{scattering}}$  代入上式，有散射电子束的电流强度

$$I_{b,\text{scattering}} = \frac{I_0}{R^2} \left[ \sum_{k=1}^N f_k^2(s) + \sum_{j=1, k=1 (j \neq k)}^N f_k(s) f_j(s) e^{i\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_{kj}} \right] \quad (14.11)$$

其中， $\mathbf{r}_{kj} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j$ 。等式右边第一项只与单独的原子特性相关，与样品整体空间分布结构无关；第二项与样品的物质结构相关，因为包含  $\mathbf{r}_{kj}$ ，即原子间的相对位置。样品的结构信息将反映在衍射后的电子束电流密度的第二项中。留意，以上讨论中，仅假设原子的势能为球对称分布，还没有特别假设样品中的原子的具体排列形式。下一小节介绍一种特殊情况，当样品中的原子为严格周期排列时，称晶体衍射 (crystal diffraction)。

此式在一般的量子力学教科书中会介绍，感兴趣的读者可以自行查找。

### 14.2.1.2 晶体衍射

顾名思义，晶体内部原子呈规则且周期性排列，因此，电子散射强度在某些方向会得到相干增强。出现衍射极大值需要满足两个必要条件<sup>7</sup>：

- 满足布拉格定律  $\Rightarrow$  即要求散射或反射角  $\theta$ 、电子波长  $\lambda$  和晶面间距  $d$  满足一定的关系，且
- 结构因子 (structure factor)  $F_{hkl}$  不能为零  $\Rightarrow$  根据晶格晶胞的基元结构，要求  $F_{hkl} \neq 0$ 。

以上两条件都要满足，如果只满足布拉格定律，但  $F_{hkl} = 0$ ，将不会出现衍射极大值。布拉格定律与结构因子的定义总结如下：

#### 定律 14.1. 布拉格定律 (Bragg's law)

又称布拉格条件，参考图 14.4，适用于电子束与 X 射线衍射，衍射样斑的极大值 (亮点) 将发生在满足布拉格定律时，有

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (14.12)$$

其中，

- $n \in \mathbb{Z}$  为衍射阶数 (order)，一般情况下，最明显的衍射为  $n = 1$
- $\lambda$  是入射束的波长，可以是光束的中心波长或电子束的物质波波长
- $d$  是晶面间距
- $\theta$  是入射角，又称布拉格角 (Bragg angle)

**注** 电子束团中的那些不满足布拉格定律的电子/物质波将散射而不形成明亮的衍射斑。

**注** 总衍射角为  $2\theta$ 。

**注** 布拉格定律为运动学衍射理论 (kinematical diffraction theory) 的基础。除了布拉格定律，运动学衍射理论中的还有一个重要定理，称劳厄条件 (Laue condition) 或劳厄方程 (Laue equation)，为布拉格定律的向量版本。不同于布拉格定律，劳厄条件的形式能够描述更一般的衍射过程。

**笔记** 以上运动学衍射理论考虑的是单次弹性碰撞的衍射结果。如果样品太厚——一般指样品厚度远大于探针粒子的平均自由程 (mean free path)——或者需要考虑探针粒子在样品中的多次衍射，此时，运动学衍射理论不再成立，而有动力学衍射理论 (dynamical diffraction theory)。平均自由程的概念在 §11.3 介绍过，其中， $A_\perp$  可替换为上面介绍的弹性散射截面  $\sigma$ 。

<sup>7</sup>非充分条件。这是因为不同层的晶面上的原子分布并不一定完全相同 (即不同晶系结构)，可能相邻晶面错开一个固定偏移，导致不同晶面间的散射波无法形成建设性干涉。单晶表示只有一种晶系结构。

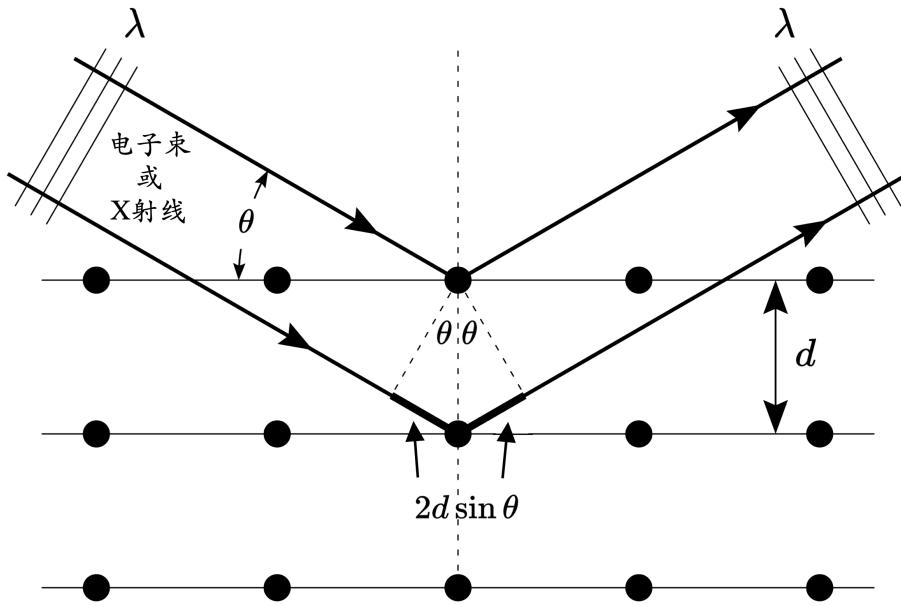


图 14.4: 布拉格定律。衍射样斑的极大值(亮点)将发生在满足  $2d \sin \theta = n\lambda$  时。当  $\theta$  很小时, 有  $2d\theta \approx n\lambda$ 。

#### 定义 14.3. 结构因子 (structure factor) $F$ 、形状因子 (shape factor) $G$

首先, 定义两种描述晶格坐标的向量:

#### 定义 14.4. $\mathbf{r}_g, \mathbf{r}_0$

平移向量 (translation vector)  $\mathbf{r}_g$ , 描述晶体里重复的晶格单元的, 定义为

$$\mathbf{r}_g = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + o\mathbf{a}_3 \quad (14.13)$$

其中,  $m, n, o \in \mathbb{Z}$  为整数。

另外,  $\mathbf{r}_0$  描述结构单元 (unit cell, 基元) 内原子位置, 定义为

$$\mathbf{r}_0 = x\mathbf{a}_1 + y\mathbf{a}_2 + z\mathbf{a}_3 \quad (14.14)$$

其中,  $x, y, z \in \mathbb{R}$  为实数。以上  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  为晶格向量 (lattice vectors)。有时候还可用米勒系数 (Miller indices)  $h, k, l$  描述, 定义为

$$\mathbf{s} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 \quad (14.15)$$

其中,  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  为倒易晶格向量 (reciprocal lattice vectors), 满足

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (14.16)$$

结构因子定义为

$$F = \sum_{j=1}^n f_j(s) e^{-is \cdot \mathbf{r}_{0j}} = \sum_{j=1}^n f_j(s) e^{-2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)} \quad (14.17)$$

其中,  $n$  为周期结构单元中的总原子数。结构因子  $F$  的取值仅与结构单元内的原子位置与分布形态有关。

形状因子定义为

$$G = \sum_{m,n,o}^N e^{-i(\mathbf{s}+\epsilon) \cdot \mathbf{r}_g} \quad (14.18)$$

其中,  $N$  为样品中的总结构单元数,  $\epsilon$  表征晶体内结构单元间的“误差”(称 excitation error 或 deviation error)。形状因子  $G$  的取值与晶体外部整体形状有关。

**注** 晶体的  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  实空间描述与  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  倒易空间描述有类似于傅里叶变换的关系。

**注** 这里介绍的“形状因子”体现材料结构参数与衍射强度的关系。此“形状因子”的形式类似于第 9 章描述多电子电磁辐射时的横纵向形成因子或第 10 章描述 FEL 的密度调制函数或第 13 章描述微束团动力学的群聚因子。□

根据衍射电子束电流强度分布, 电子衍射样斑其实是样品原子空间结构的傅里叶变换。换句话说, 电子衍射样斑是样品结构在倒易空间 (reciprocal space) 的呈现。因此, 分析倒易空间的衍射样斑信息, 比如: 衍射峰位置、对称性、强度、宽度等, 可以反推得到样品内部的原子在实空间分布的结构信息。

**位置、对称性** 电子束经过原子构成的晶体点阵时形成衍射样斑, 该样斑分布由晶格的瞬时结构决定。因此, 超快电子衍射获得的电子衍射样斑可以用于反推在该时刻的晶格结构。参考图 14.5。

对于单晶 (single crystal) 样品, 透射束穿过薄膜样品到显示屏形成中间亮斑, 衍射束则偏离透射束形成有规则、离散的衍射斑点阵。靠近透射束的衍射斑强度较大 (较亮), 周围衍射束的强度逐渐减弱。电子衍射样斑的对称性可用二维倒易点阵平面的对称性加以解释。衍射斑点的间距与晶面距离成反比, 衍射斑点形成规则的几何形状, 与二维倒易空间中的点阵分布相同。

对于多晶 (polycrystalline) 样品, 由于晶粒数目大, 且晶面位向在空间不再单一分布, 衍射样斑不再是离散的点, 而是由不同半径的同心圆组成, 或者视为由单晶样品的衍射样斑以中心旋转  $360^\circ$  形成。倒易空间的点变成倒易球分布。类似地, 同心圆的半径与晶面间距成反比。同心圆环衍射线的形状与入射电子束的方向无关。

非晶样品 (amorphous sample) 短程有序, 长程无序, 没有任何周期性结构, 不再具有平移周期性, 因此也不再有点阵。由于非晶样品中的原子形成的这些多面体在空间的取向是随机分布, 不再出现清晰的圆结构而呈现弥散的衍射环。通常用原子径向分布函数描述其衍射图。

不难预期生成的衍射样斑同心圆半径与相应晶面的面间距相关。由图 14.5, 当  $\theta \ll 1$

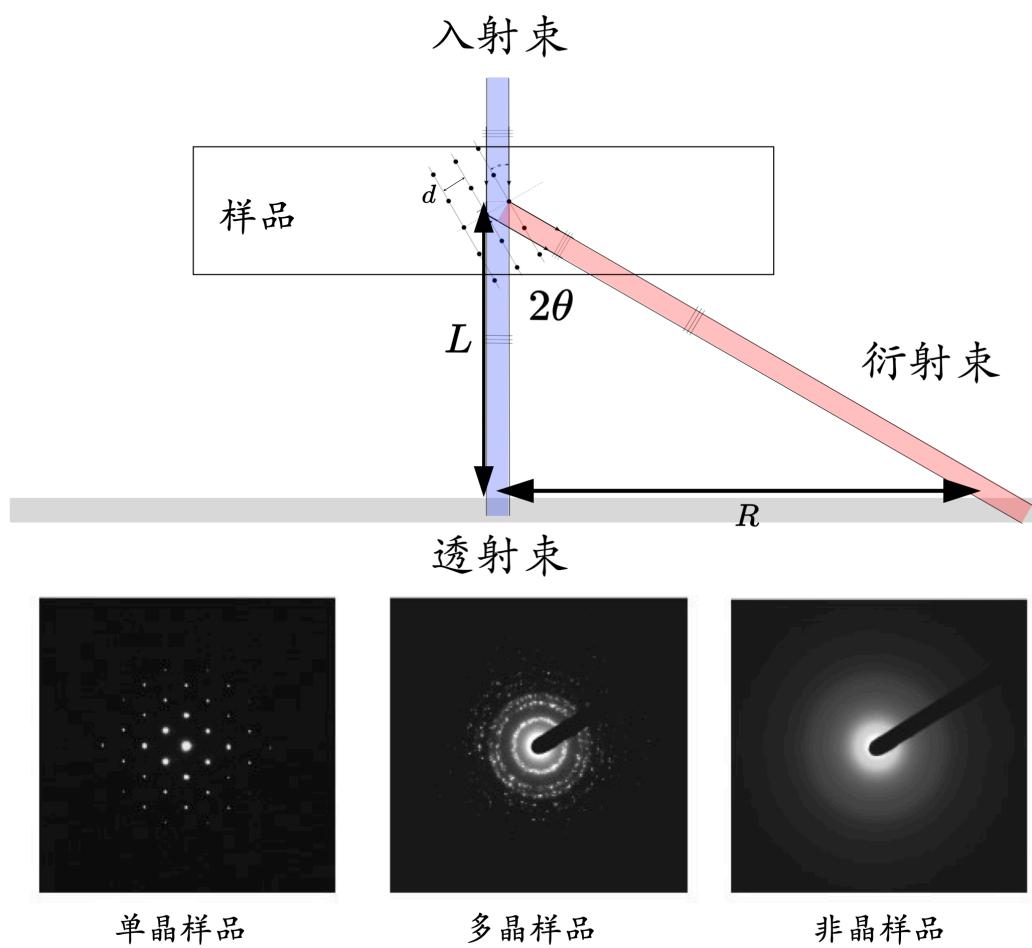


图 14.5: 衍射样斑示意图, 满足  $Rd = \lambda L$ 。下图取自[https://www.mst.or.jp/Portals/0/en/en\\_ed.html](https://www.mst.or.jp/Portals/0/en/en_ed.html)。

时，有

$$\frac{R}{L} = \tan 2\theta \approx 2\theta \quad (14.19)$$

根据布拉格定律，有

$$\frac{\lambda}{d} = 2 \sin \theta \approx 2\theta \quad (14.20)$$

于是

$$Rd = \lambda L \quad (14.21)$$

衍射样斑同心圆半径  $R$  与相应晶面的面间距  $d$  可以通过入射束波长  $\lambda$  与衍射屏距离  $L$  关联。

**强度** 按前面结构因子与形状因子的介绍，单电子衍射强度有  $I \propto |F|^2|G|^2$ 。样品厚度也会影响衍射强度：样品太薄的话，无法积累足够的电子衍射；样品太厚（比平均自由程厚）的话，单次弹性散射的电子数将大大减少。因此，适当的样品厚度才能得到足够的衍射强度。此外，前面的介绍假设样品中的所有原子都固定在理想晶格位置上固定不动。但是，原子由于热运动将会围绕其平衡位置产生随机振动，并且随着温度上升，其热运动的幅度会增加，从而降低衍射峰强度。

量化分析通常采用原子偏移位置的均方  $\langle u^2 \rangle$  ( $u = x, y, z$ ) 描述，表征系统热振动幅度。当系统达热平衡时， $\langle u^2(T) \rangle$  仅与晶格温度  $T$  相关。温度对衍射强度的影响可由 Debye-Waller 模型描述，总结如下：

### 定理 14.2. Debye-Waller 公式

温度对衍射强度的影响可写成

$$I_{\text{scattering}}(T) = I_{\text{scattering}}^0 e^{-\frac{s^2}{3} \langle u^2(T) \rangle} = I_{\text{scattering}}^0 e^{-\frac{1}{2} s^2 B(T)} \quad (14.22)$$

其中，Debye-Waller 因子 (Debye-Waller factor, DWF)  $B(T)$  可写成

$$B(T) = \frac{6h^2 T}{m_{\text{原子}} k_B \theta_D^2} \left( \frac{T}{\theta_D} \int_0^{\theta_D/T} \frac{x dx}{e^x - 1} + \frac{\theta_D}{4T} \right) \quad (14.23)$$

其中，

- $h = 6.626^{-34}$  J s 为普朗克常数
- $T$  为晶格温度
- $m_{\text{原子}}$  为原子质量
- $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$  J K $^{-1}$  为玻尔兹曼常数
- $\theta_D$  为 Debye 温度

当晶格温度  $T > \theta_D$  时， $B(T)$  与  $T$  大致成线性关系，可简化写成  $B(T) \approx b_0 + b_1 T$ 。

将此简化形式代回  $I_{\text{scattering}}(T)$ , 有

$$\frac{I_{\text{scattering}}(T + \Delta T)}{I_{\text{scattering}}(T)} = e^{-\frac{1}{2}s^2 b_1 \Delta T} \quad (14.24)$$

一般通过测量到的强度变化反推晶格温度变化  $\Delta T$ 。

以上讨论的温度为样品总体温度  $T$ 。在一些样品中，特别是金属或半导体，样品中的电子温度  $T_e$  和晶格温度  $T_\ell$  可能不同。在泵浦激发后，电子温度通常会先迅速升高，晶格温度则相对较慢，最终达平衡。同时，温度随“时间” $t$  变化，为扩散效应。描述温度随时间演化的模型不止一种，较常用的有双温模型 (two-temperature model)。由此，上述的  $u(T)$  可写为时间相关的函数，即  $u(T; t)$  或  $u(t - t_0)$ ，其中， $t_0$  为泵浦时刻。

#### 定义 14.5. 双温模型 (two-temperature model, TTM)

双温模型的一般方程可写为

$$\begin{aligned} c_e \frac{\partial T_e}{\partial t} &= \nabla(\kappa_e \nabla T_e) - K_{e,\ell}(T_e - T_\ell) + I_{\text{pump}}(t) \\ c_\ell \frac{\partial T_\ell}{\partial t} &= -K_{e,\ell}(T_e - T_\ell) \end{aligned} \quad (14.25)$$

其中，

- 下标  $e$  表示电子相关量，下标  $\ell$  为晶格相关量
- $t$  为时间
- $T_e, T_\ell$  为电子与晶格的 (绝对) 温度
- $c_e, c_\ell$  为比热 (specific heat)
- $\kappa_e$  为电子的热导率
- $K_{e,\ell}$  为电子与晶格 (声子) 的热耦合系数 (thermal coupling)
- $I_{\text{pump}}$  为晶格吸收的泵浦激光强度

**注** 双温模型一般用来描述超短强脉冲激光与材料相互作用的过程，应用不限于这里的电子衍射，也常应用于描述激光烧蚀 (laser ablation) 过程等。关于求解或更多关于双温模型的讨论，这里不展开介绍，感兴趣的读者请自行查阅相关文献。

**宽度** 在衍射样斑中，除了衍射峰位置和强度反映晶格结构变化外，衍射峰的宽度也是一个重要的指标。如果晶体和电子束都是理想的，所有衍射峰的宽度将为零。但是，实际情况下，电子束的有限尺寸和晶体的缺陷 (defect) 都将导致衍射峰具有有限宽度。此处仅定性讨论，更多讨论应参考相关文献或专著。



**笔记** 图 14.5 上图将入射束、衍射束的角度关系与样品的倒易空间有非常漂亮的对应关系，称 Ewald 衍射球或 Ewald 球 (Ewald sphere)。布拉格定律是衍射条件在实空间的表示法，Ewald 球则是衍射条件在倒易空间中的描述。细节此处不论，对晶体标定、电子衍射与显微理论感兴趣的读者，可参考 L.-M. Peng, S.L. Dudarev, and M.J. Whelan, High-Energy

Electron Diffraction and Microscopy, Oxford Science Publications (2011)。

关于衍射图像的清晰程度,除了衍射峰的强度、宽度之外,还与图像的信噪比(signal-to-noise ratio, SNR)有关,不同的实验对图像信噪比的要求不尽相同。如果仅考虑电子束的散粒噪声(shot noise),则  $\text{SNR} = \sqrt{N}$ ,其中,  $N$  为对应衍射峰的电子个数  $\neq$  束团总电子数。

### 14.2.2 电子束亮度

虽然 UED 的电子束不“发光”,即不产生电磁辐射,但是 UED 电子束的品质时常与 FEL 要求的电子束品质不相上下,因此也常用电子束的“亮度”表征 UED 电子束的性能。

#### 定义 14.6. 电子束亮度: 五维

作为束流动力学中的衡量电子束综合品质的参数,定义束团的五维亮度如下

$$\mathcal{B}_{5D} = \frac{I}{\epsilon_x \epsilon_y} = \frac{Q}{\sqrt{2\pi} \epsilon_x \epsilon_y \sigma_t} \quad (14.26)$$

其中,

- $I$  为电子束的电流强度(流强)
- $I = Q/\sqrt{2\pi}\sigma_t$
- $Q$  为电子束的电荷量
- $\sigma_t$  电子束的束团长度
- $\epsilon_{x,y}$  为电子束在横向两个维度上的几何发射度

**注** 对于束团质量的衡量最开始使用的是上述的五维亮度描述,但对电子束来说,可通过磁聚焦结构操纵其纵向相空间,从而改变电子束的峰值电流,因此,五维亮度在现代加速器中未必总是为常数,而是一个可能随  $s$  改变的量。有些读者可能觉得使用基于六维相空间的六维亮度来描述似乎是更好的选择,也符合 §6.2 介绍过的 Liouville 定理的结论。但是,六维亮度因为受到束团内粒子间散射的影响—在低能量情况下散射效应更明显,与各种电子源的比例关系更为复杂,同时在实验上测量束团的纵向相空间也非常困难。因此,目前采用六维亮度描述的工程实际意义不大。对于束团纵向与横向耦合较小或可忽略的情况,量化电子束亮度可限制在横向相空间就行,即考虑以四维亮度描述电子源的质量。



**笔记** 用“亮度”来表征电子束的品质的想法最初并非源自加速器社群,而是来自电子显微镜领域。早在 1930 年代,两位德国物理学家 B. von Borries 与 E. Ruska<sup>8</sup>便提出此概念。当时依循直观的观察,即电荷或电流越高的、越能够被聚焦的电子束,其亮度就应该越高,于是定义  $B \propto I/\sigma_r \sigma_{r'}$ 。随后,人们观察到此一数值在电镜中大致维持定值。

<sup>8</sup>Ernst Ruska 由于在电子光学领域的杰出贡献,与其他两位开发扫描隧道显微镜(scanning tunneling microscope, STM)的物理学家 Gerd Binnig 与 Heinrich Rohrer 三位一同获得 1986 年诺贝尔物理学奖。

### 定义 14.7. 电子束亮度：四维

四维亮度的量化定义基于光发射电子的初始散角与其平均横向动能 (mean transverse kinetic energy, MTE) 相关，散角又为束团初始发射度的一部分。之后通过计算注入场设定的电荷密度极限来获得。对于由超短激光产生的束团，可以近似为薄电荷盘，由此将电子束四维亮度定义为

$$\mathcal{B}_{4D} = \frac{m_e c^2 \epsilon_0 E_{acc}}{2\pi \times MTE} \quad (14.27)$$

其中， $E_{acc}$  为光阴极的电场强度。留意，此处能从阴极拉出来的电子束电荷密度与  $E_{acc}$  相关。

由上式可以找到提高电子亮度的两个途径：

1. 增加在阴极处的加速电场；
2. 减小发射电子的速度差异，即减小 MTE。 □

### 定理 14.3. 平均横向动能

基于自由电子模型 (free electron model)，当在光阴极发射的电子在光电效应阈值之上时，平均横向动能 (mean transverse kinetic energy, MTE) 有

$$MTE \approx \frac{E_{ex}}{3} \quad (14.28)$$

其中， $E_{ex}$  为入射光子能量与功函数抵消后的剩余能量，可写为

$$E_{ex} = h\omega - \Phi_{eff} \quad (14.29)$$

其中，等效功函数  $\Phi_{eff}$  有

$$\Phi_{eff} = \Phi_w - \sqrt{\frac{|e|^3 E_{acc}}{4\pi\epsilon_0}} \quad (14.30)$$

上式第二项又称肖特基功函数，下面将介绍。当  $E_{ex} \rightarrow 0$  时，上式 MTE 不再适用，应改为

$$MTE \approx k_B T \quad (14.31)$$

其中， $k_B \approx 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$  为 Boltzmann 常数。

MTE 导致的束团横向有效角散有

$$\sigma_{\beta_x \gamma} = \sqrt{\frac{MTE}{mc^2}} \quad (14.32)$$

当打在光阴极上的激光横向尺寸为  $\sigma_x$  时，就可束团初始归一化横向发射度，有

$$\epsilon_{nxi} = \sigma_x \sigma_{\beta_x \gamma} \quad (14.33)$$

其中，假设光电发射过程的  $x, x'$  不存在耦合。



**笔记** 更多讨论可参考 J. Feng et al., Thermal limit to the intrinsic emittance from metal photocathodes, Appl. Phys. Lett. **107**, 134101 (2015). <https://doi.org/10.1063/1.4931976>。



UED 采用电子束作为探测(探针)捕捉动态演化过程, 其束团长度类似于相机的快门时间, 决定了时间分辨率的精度。为了获取更准确的超快动力学信息, 需要不断压缩电子束的长度并提高其亮度。然而, 电子束作为一种“探针”, 在束团内电子密度越来越大的情况下, 不可避免会出现第11章介绍的空间电荷效应, 这一效应与电子束中的电子之间的库仑斥力有关, 随着电子密度的增加而增加, 导致束团的长度与电子数目之间存在冲突。定性而言, 空间电荷效应会导致束团长度拉伸、发射度增加等不利后果, 严重影响了束流的品质, 从而降低了探测的时空分辨率。在研究可逆的超快过程时, 也许还可以通过限制电子数量来提高时间分辨率, 尽管这么做会减少衍射图像中的有效信息, 因此需要更多实验时间, 反复进行泵浦-探测过程以积累足够清晰的图像。更重要的是, 空间电荷效应还可能导致电子束流的集体不稳定性等问题, 成为限制 UED 性能的障碍。克服空间电荷效应以提高电子束性能成为一项至关重要的研究任务。

许多材料中的超快过程都是不可逆的, 因此只能通过单次泵浦-探测实验来获得有关这些过程的信息。在每次泵浦后, 使用高电荷量的单发电子脉冲来探测样品, 以求一次获取清晰的衍射图像。由于无需多次泵浦-探测, 这种方法对样品的辐射损伤较小, 能够在样品受到照射损害之前获得足够的电子衍射信息。这种方法是未来 UED 研究的一个重要发展趋势, 特别适用于不可逆过程的超快动力学研究, 例如生命科学领域。然而, 有机大分子主要由较轻的原子组成, 要获得清晰的图像, 探测大分子结构等通常需要约  $10^7$  个电子。这意味着不可逆过程的超快动力学研究需要电子“探针”的亮度比传统 UED 高 2 到 3 个数量级, 其束团的峰值流强需要与现有的 FEL 电子束相当, 因此空间电荷效应对束团品质的影响变得显著。这为电子束的生成和维持带来了巨大挑战, 特别是当研究样品的尺寸随着分子结构的复杂性而减小时, 对电子束的亮度要求急剧增加, 空间电荷效应也随之增强, 导致电子束质量下降, 从而影响了时间分辨率和图像清晰度。因此, 研究电子束在六维相空间中的行为, 以及采取抑制空间电荷效应措施, 成为未来 UED 研究必须解决的核心问题。

发展高亮度超快电子源是下一代 UED 的重要基础。为满足 UED 对时空分辨率及单发成像的追求, 对电子束品质不断提出新的要求。其中, 电子束的亮度和束长是 UED 最为重要的两个指标, 意味着越来越多的电子聚集在越来越短的束团中。低能电子束的空间电荷效应随着电荷量的增加而急剧增大, 天然的局限使其难以产生满足单发工作要求的超快电子束。产生高亮度超快电子束的根本挑战是如何抑制空间电荷效应, 尤其在电子刚从光阴极产生时。因此, 从源头入手, 使电子束尽快摆脱低能区而进入高能区, 提高 RF 电子枪在阴极处的加速电场梯度是抑制空间电荷效应最直接的方法。加速场强增加, 电子的能量增益增加, 电子能量提高, 空间电荷效应就能得到缓解。理论上, 还可

以提高电子枪的工作频率用来提高表面电场击穿损伤的阈值。比如，采用太赫兹电子枪，其加速梯度可从  $\sim 50 \text{ MV/m}$  提高到至  $\sim \text{GV/m}$ ，极大抑制了空间电荷效应对电子束的影响。但目前研究仍处于初始阶段，难以实际应用。对于 UED 应用，重要的是如何在传统 RF 电子枪的基础上，通过优化电子枪的电磁结构参数，提高电子注入加速腔时光阴极处的加速电场梯度来降低空间电荷效应。调节 RF 腔的半腔长度可改变电子注入时的加速电场梯度与输出时的品质因数，以满足不同的应用需求。

电子枪产生的电子束品质决定整体 UED 系统能达到的最高性能。早期的 UED 基于光阴极直流电子枪，电子能量一般小于  $100 \text{ keV}$ ，由于空间电荷效应限制，难以产生更高亮度的电子束。近年提出采用 1.6-cell 或 1.4-cell 微波电子枪作为 MeV 电子源，其优点是电子间的库仑斥力显著降低，与泵浦激光的速度失配小等。无论如何，关于超快电子成像电子源近几年的发展趋势，由过去直流高压、相对低能量 keV 量级的电子束转变为现在基于射频加速腔、相对高能量 MeV 量级的电子束。

$$\boxed{\text{DC-keV UED}} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\text{RF-MeV UED}}$$

### 14.2.3 兆伏超快电子衍射：总论

兆伏超快电子衍射为 mega-electron-volt ultrafast electron diffraction (MeV-UED)。以下给出 MeV UED 的简短、定性描述。兆伏、飞秒束长级别的电子束在 S 波段光阴极射频/微波电子枪中产生。射频/微波电子枪由基于脉冲形成的调制器 (modulator) 和一约几十 MW 的 S 波段速调管 (klystron) 供电。射频振幅一般要求稳定性有  $10^{-4}$  (rms) 和相位稳定性约  $30 \text{ fs}$  (rms)。通过光电效应产生电子，约有  $0.5\text{-}1 \text{ mJ}$  的红外激光光束用于产生紫外激光，从而从铜光阴极产生电子。紫外激光束以约  $70^\circ$  入射角照射到光阴极上。电子离开光阴极后，一般采用螺线管聚焦低能电子束。射频/微波光阴极枪与样品室环境通过两级差分泵浦隔离。第一级泵浦包含可插入束团诊断或束测设备 (diagnostics) 和光阑。在光阴极下游处的束测设备包含磷光屏用来对电子束的横向位置进行测量，法拉第杯用来量化电子束团电荷等。光阑可以是狭缝 (slit) 或准直器 (collimator)，尺寸一般为可变，比如  $100$ 、 $200$  和  $500 \mu\text{m}$  直径。在差分泵浦后可能安装第二个螺线管提供横向聚焦或安装纵向压缩设备，使电子束的横向束腰或纵向束长可在样品位置或探测器位置优化。在样品室之前一般还需要安装一带孔的激光入射镜用来泵浦样品。以上仅简短、定性描述，下一节将根据组成单元分别介绍。

## 14.3 MeV UED 组成单元

### 14.3.1 MeV UED 束线

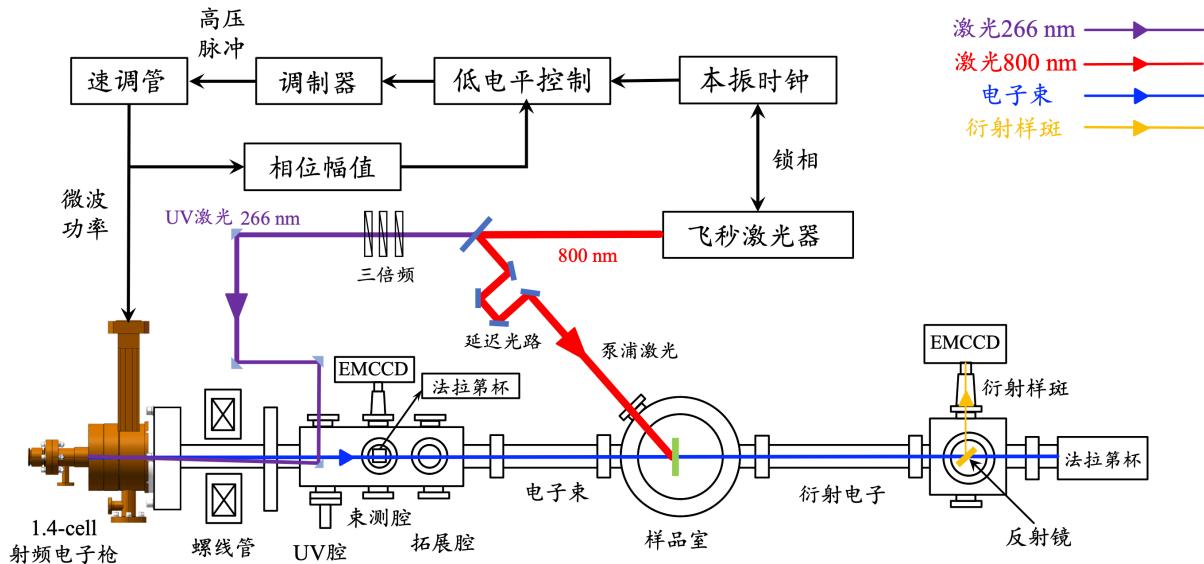


图 14.6: UED 系统示意图，包含各个子系统。

超快电子衍射平台的基本组成单元如图 14.6 所示。更细致的 UED 总体系统如图 14.7 所示。这里的 1.4-cell 微波电子枪为束线起点，由 UV 激光（波长 266 nm）照射光阴极，通过光电效应产生飞秒束长的电子束，经过微波电子枪加速到约 3 MeV 的总能量。1.4-cell 微波电子枪的微波功率由速调管 (klystron) 提供，该功率由调制器 (modulator) 控制。由于微波电子枪的射频场需要和激光系统保持同步 (synchronization)，因此飞秒激光器与射频系统的本振时钟 (master clock) 锁相，通过低电平控制系统调节调制器 (low-level RF system, LLRF) 的触发信号的相位，进而实现射频场的相位控制。

由于空间电荷效应，微波电子枪出口处的电子束具有明显的横向散焦效果，因此需要在微波电子枪出口设置螺线管，通过螺线管的纵向静磁场约束电子束的横向发散。螺线管下游分别是 UV 腔、束测腔和拓展腔。UV 腔中安装有反射镜，用于将 UV 激光反射到光阴极，反射镜由二维调节杆控制，可进行平移和旋转操作。束测腔中配置了插入式的荧光屏、法拉第杯、光阑 (aperture) 等器件，用于进行电子束横向位置、尺寸、电荷量等基本参数的测量，确保电子束满足探测样品的要求。拓展腔为 UED 束线的升级预留空间，用于进行 THz 驱动的束团操控研究。

在激光泵浦 (pump) 样品之后，飞秒电子束在经过横向聚焦和测量后进入样品室作为探针 (probe)，探测样品。用于激发样品的 800 nm 泵浦激光由主激光分光得到，由延迟光路 (delay line) 进入样品室。延迟光路由平行反射镜组成，通过调节反射镜的位置改变光路长度，进而调节泵浦激光与电子束到达样品的相对时间差，由此获得样品不同时间点的衍射样斑。衍射后的电子束经过 2~3 米的飞行，不同阶 (order) 的衍射样斑逐渐

其中，

- $\tau_{\text{laser}}$  是泵浦激光时域长度 (或称激光脉宽)
- $\tau_{\text{e-beam}}$  是电子束的时域长度 (或称电子束长)
- $\tau_{\text{jitter}}$  是泵浦激光与电子束在样品处的到达时间抖动 (time of arrival jitter)
- $\tau_{\text{vm}}$  是泵浦激光和电子束不同的飞行速度引起的速度失配项 (velocity mismatch)<sup>a</sup>。

UED 的空间分辨率影响衍射图像的品质，要求电子束在轰击样品时的横向相干长度必须大于样品的结构尺寸<sup>b</sup>。电子束的横向相干长度 (coherence length) 定义如下

$$L_{\perp} = \frac{\lambda_e}{2\pi\sigma_x} = \frac{\hbar\sigma_x}{m_e c \epsilon_{Nx}} \quad (14.35)$$

其中，

- $\lambda_e$  是电子的物质波波长  $\lambda = \frac{h}{\gamma m_e c \beta}$ ,  $h$  为普朗克常数,  $\hbar = h/2\pi$  为约化普朗克常数
- $\sigma_x$  为电子束在束腰处的横向尺寸均方根值
- $\sigma_{x'}$  为电子束在束腰处所有电子横向散角的均方根值
- $\epsilon_{Nx} = \beta\gamma\epsilon$  为束团横向归一化发射度

横向相干长度表征能够覆盖样品结构尺寸的范围。在 UED 设计阶段，更多时候可能用横向发射度衡量，电子束的横向发射度可近似认为与其横向相干长度成反比。

**注** 按类似于横向相干长度的定义，还可以定义电子束的纵向相干长度，有

$$L_{\parallel} = \frac{\lambda_e}{2\pi\sigma_{\delta}} = \frac{\lambda_e^2}{2\pi\sigma_{\lambda}} \quad (14.36)$$

其中， $\sigma_{\delta} = \sigma_{\Delta E}/E_0 = \sigma_{\lambda}/\lambda$ ,  $E_0$  为参考能量。对应的纵向相干时间有

$$t_{\text{coh}} = \frac{L_{\parallel}}{\beta c} = \frac{h}{2\pi\sigma_{\Delta E}} = \frac{h}{2\pi E_0 \sigma_{\delta}} \quad (14.37)$$

其中， $\sigma_{\delta}$  为电子束相对能散。

<sup>a</sup>物质中原子运动的时间尺度在 100 fs 量级，因此理想的超快电子衍射的时间分辨率需要在 100 fs 以内才能精确观测物质中原子的结构变化过程，这要求上述四项时间量明显小于 100 fs。

<sup>b</sup>理想情况下，电子束的横向相干长度最好为晶格结构尺寸的 3 倍以上。 □

**练习 14.1** 以上定义电子束横纵向相干长度的方式源于光学，感兴趣的读者可思考一下为什么相干长度有  $\lambda/2\pi(\dots)$  形式。 ■

### 14.3.2 激光系统

电子束的初始参数由激光脉冲决定。飞秒激光器产生的激光脉冲经过偏振分束器 (polarizing beam splitter, PBS) 分为两束激光，其中一束激光脉冲经三倍频 (third harmonic

generation, THG)<sup>9</sup>后(266 nm)送入光阴极产生电子束，另一束激光脉冲用于泵浦样品。由于激光在传输过程中受色散效应的影响，如果没有色散补偿，脉冲宽度将会逐渐增大。由于266 nm激光脉冲直接决定了飞秒电子束的初始参数，因此需要对其脉冲能量和指向抖动进行测量。通过光功率计记录一小时中激光功率的变化得到平均脉冲能量和能量抖动。光斑中心抖动主要来自于光路和光学平台细微的振动，导致激光的落点存在细微变化。

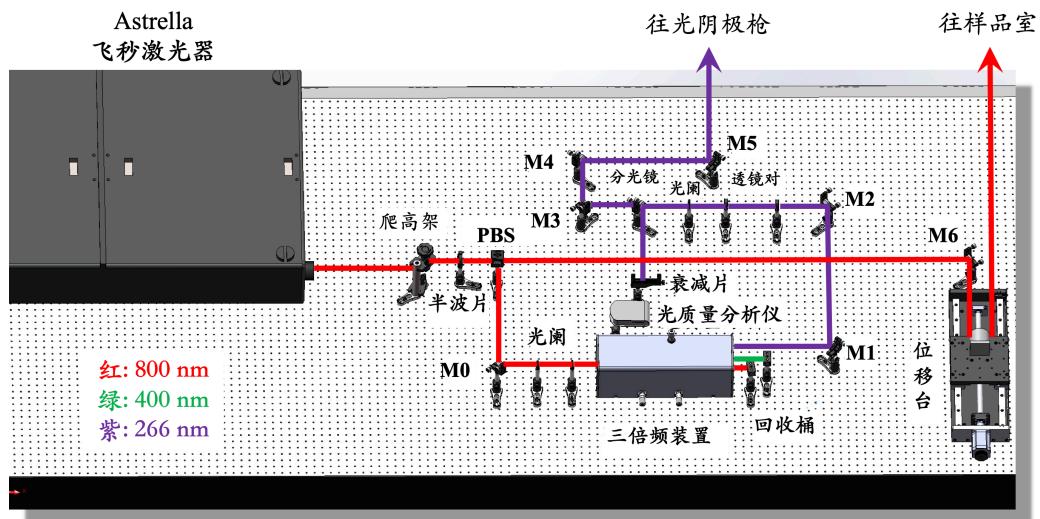


图 14.8: 飞秒激光系统。

获得紫外激光后，往往会根据具体需求对紫外激光的脉宽和横向分布再次进行调整。比如，当降低电荷量后，如果忽略空间电荷力和电子枪中的压缩效果的影响，可近似认为所产生的电子束脉宽与紫外激光脉宽相当；此时，为降低电子束脉宽就需要首先降低紫外激光的脉宽。在三倍频的过程中，由于晶体的色散效应，紫外脉冲的宽度往往会长于800 nm激光，因此，可以在产生紫外激光后利用光栅对紫外光进行再次压缩以获得更短的脉宽。为降低空间电荷力的影响，一般也需要紫外激光在横向均匀分布，这既可以利用专门的光斑整形系统实现，也可以利用小孔仅选择高斯分布激光中的中心平顶部分实现。

考虑到飞秒激光在远距离传输过程中受到很多限制，比如，自相位调制、自聚焦，甚至成丝等，即使理论峰值功率密度没有达到空气自聚焦的阈值，也会由于空气扰动等因素引起局部自聚焦效应，影响光束品质。因此，在超快电子衍射中，一般应当将压缩前带有频率啁啾的数百皮秒脉宽激光从激光室传输至实验大厅后，再就近对激光脉宽进行压缩，这样可避免传输高功率激光可能带来的品质下降。此外，由于激光的传输距离一般为几米甚至十几米，为了最大程度消除因为衍射造成的激光横向分布的变化，同时降低激光

<sup>9</sup>三倍频仪的工作原理为基于光学的二阶非线性效应中的二次谐波产生 (second harmonic generation, SHG, 即  $\omega_1 + \omega_1 \rightarrow \omega_2$ ) 与合频产生 (sum-frequency generation, SFG, 即  $\omega_1 + \omega_2 \rightarrow \omega_3$ ) 过程，其中， $\omega_1$  为基频、 $\omega_2$  为二次谐波、 $\omega_3$  为三次谐波。入射三倍频仪的基频波  $\omega_1$  经过 SHG 晶体产生二次谐波  $\omega_2$ ，产生的二次谐波与剩余的基频波在 THG 晶体中通过合频产生三次谐波  $\omega_3$ 。对超短激光脉冲的三倍频合成，要求最大程度的时间重合以保证转换效率。为了补偿 SHG 过程中基频波和二次谐波的群速度失配效应，需要在 SHG 和 THG 中间插入时间延迟补偿片，确保 THG 过程中的基频波和二次谐波的时间重合。一般来说，三倍频仪的能量转换效率约 10%。

长距离传输带来的指向性问题，应采用像传递的方法把初始激光横向分布成像在光阴极面上。这种采用像传递原理的传输光路等效于缩短激光的传输距离，从而大大抑制了由于激光系统指向稳定性带来的在光阴极面上的位置抖动，提高电子束流的稳定性。

### 14.3.3 射频系统：光阴极电子枪、加速腔

#### 14.3.3.1 射频系统

包含低电平系统 (low-level RF, LLRF)、时序 (timing) 系统、高压功率源、波导系统等。

**低电平系统** 在微波系统中起中枢控制的作用，主要由信号源、射频前端和数字信号处理系统组成。它的主要功能有：

- 控制微波幅值和相位。低电平系统接收到晶振源的信号后将其转换为脉冲信号，并且可对自己输出信号的幅值和相位进行改变，实现对下游的微波（最终是电子枪内的微波场）幅值和相位的控制。
- 闭环反馈。晶振源一般工作在恒温环境中，且性能稳定，所以能够输出稳定的微波。但下游的微波设备一方面受自身工作性能的影响，另一方面受环境（如：温度）变化的作用，输出的微波会引入不同程度的抖动和慢漂。设备之间传输微波的电缆和波导也同样会因为环境因素引入对微波的扰动。为了在加速腔内建立稳定的加速电场，需要从加速腔中提取小功率微波信号，反馈给低电平系统。低电平系统根据提取信号相对于晶振源的变化，主动改变其输出微波的幅值和相位，以降低电子枪处微波的抖动，实现长期稳定运行。
- 监测与保护。除了加速腔的微波提取信号，低电平系统还监控放大器、速调管等设备输出的微波信号以及腔的反射信号，方便在微波系统异常时排查故障设备。低电平系统还能提供安全联锁保护功能，当打火剧烈或者反射信号过强时，主动短时间停止微波输出，避免加速腔、速调管等一些微波器件受到高功率微波损坏。
- 通信与记录。低电平系统还能与中央控制系统进行通信，实现远程控制和信息的交换，方便长时间记录各微波元件的工作状态，以便后期调用查询，分析各信号之间的相关性。

采用微电信计算架构 (MicroTCA, Micro Telecommunications Computing Architecture) 作为 LLRF 平台，该平台包含机箱、电源单元 (PU, Power Unit)、MicroTCA 集线器 (MCH, MicroTCA Carrier Hub)、中央处理单元 (CPU, Central Processing Unit)、高级夹层卡 (AMC, Advanced Mezzanine Card)、后过渡模块 (RTM, Rear Transition Module) 等。参考图 14.9。

**时序系统** 射频/微波系统以晶振源或振荡器信号为时钟，激光系统以激光振荡器的信号作为自己的时钟。因此，还需要利用激光-微波同步系统将二者的频率锁定在一起，这样才能保证每次激光照射在阴极时所产生的光电子都感受到同样的微波场相位。参考

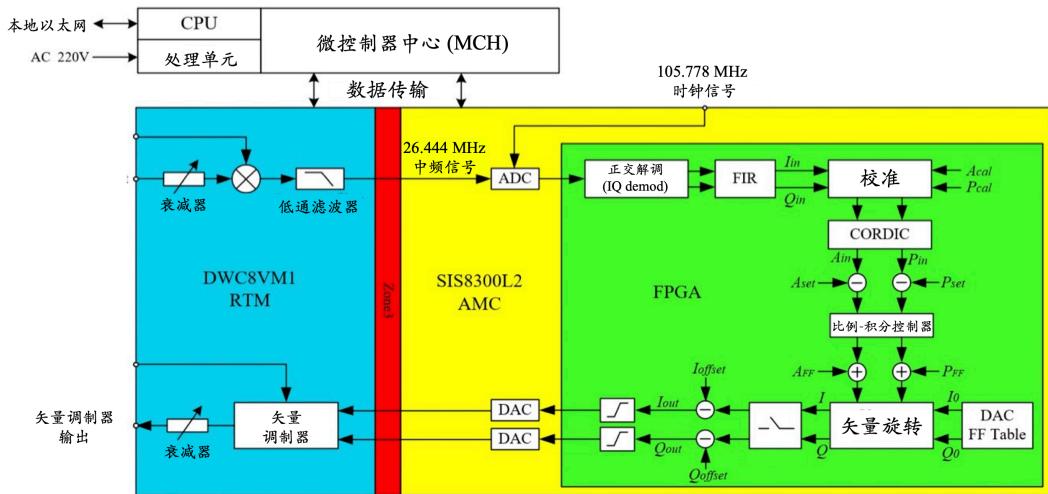


图 14.9：微波低电平系统的 MicroTCA 架构。图中 DAC 为数模转换器 (Digital-to-Analog Converter), ADC 为模数转换器 (Analog-to-Digital Converter), FIR 为脉冲响应滤波器 (Finite Impulse Response), CORDIC 为坐标旋转数字计算机 (COordinate Rotation DIgital Computer), DAC FF Table 为数模转换器前馈表。

图 14.10。

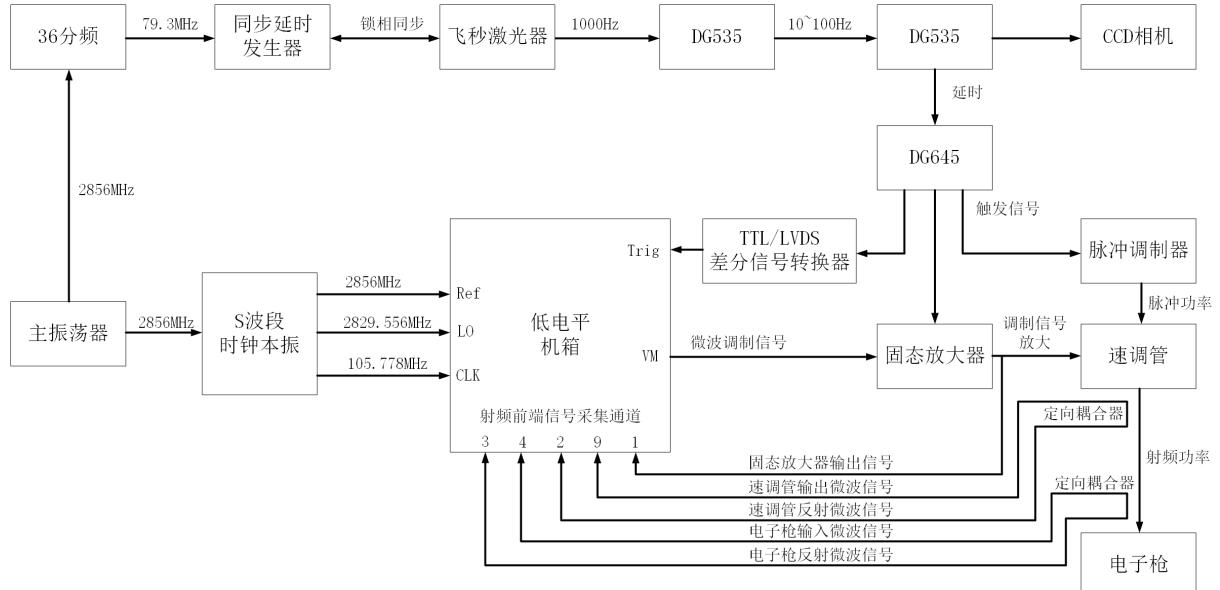


图 14.10：应用于射频/微波光阴极电子枪的时序系统示意图。

以常规的振荡器频率为 79.3 MHz 的激光系统为例，首先，将主晶振源或振荡器 (master oscillator) 输出的 2856 MHz 频率信号通过 36 分频器<sup>10</sup>(frequency divider) 转换为 79.3 MHz 频率信号输入到 Coherent 公司激光器的 Synchrolock AP 系统中进行同步，由锁相系统控制激光振荡器中的压电 (piezoelectric) 陶瓷，从而微调振荡器腔长，使得激光与微波

<sup>10</sup>激光频率分频器是一种利用激光特性的装置，用于分频或稳定输入激光束的频率，目标是生成具有精确倍数或分数关系的输出光束频率，相对于原始激光频率。典型操作涉及在频率分频器设备内使用非线性光学过程。一种常见方法是使用光频混频或谐波产生，通过输入光束与适当的非线性介质进行非线性相互作用而实现。激光频率分频器常应用在频率计量和精密测量领域，可用于生成稳定且明确定义的光频率，使其在光频标准和其它高精度实验中具有实用性。

相位同步。

以激光器产生的脉冲信号作为外部触发源来生成低电平系统、固态放大器、脉冲调制器的工作触发信号，确保激光系统与射频系统工作的同步性。采用两台 DG535，分别实现对于激光器产生的 1000 Hz 脉冲信号的降频与延时调节来降低引入的误差，DG645 分别调节三路信号各自所需的延时。

晶振源能输出连续稳定的微波，是整个系统的参考源。因为其输出是作为整个微波系统的种子信号，所以晶振源输出微波的频率、幅度和相位都要求具有非常高的稳定性。一般晶振源的相位噪声需要达到 25 fs。晶振源对环境变化比较敏感，需工作在恒温环境中，并避免较大的机械振动干扰。晶振源输出的微波信号功率在毫瓦 (mW) 量级，晶振源产生稳定的直流种子微波，输出至低电平系统。低电平系统负责控制低功率微波的幅值和相位，输出至千瓦级固态放大器将微波信号放大为 100 W 量级。千瓦级固态放大器产生脉冲的输出至速调管输出兆瓦 (MW) 级微波以便在加速腔中建立 60 ~ 100 MV/m 梯度的电场用于快速将电子加速到相对论能量。

**高压功率源** 包含前端的高压调制器与速调管，速调管由热阴极、聚焦线圈、微波腔和收集极组成。

高压调制器的输出电压用于加速速调管的热阴极产生电子，电子沿着速调管的轴向运动。获得能量的电子在经过速调管中的第一个微波腔时，与腔谐振的微波信号被馈送至输入腔，在输入腔中激起高频振荡的电磁场，由于电子束中各电子通过腔的时刻不同，将感受到不同方向与大小的电场作用而加速或减速，即速度调制。在腔间的漂移段内，由于电子束中不同电子间的速度差异，速度较快的电子赶上速度较慢的电子，形成疏密相间的电子束团，称为群聚现象，形成密度调制。经过一个或多个中间腔的作用，电子束的速度调制与密度调制不断增强，通过与腔中的微波场相互作用，将电子能量传递给微波场。最终电子到达输出腔处，并通过耦合孔将振荡的电磁场输出到波导得到高功率微波，而能量转换完成后的低能量电子则到达收集极，将剩余动能转换为热能。

速调管对微波功率的放大可以达到  $10^5$  倍。以华中科技大学正在开展的兆伏特超快电子成像装置为例，使用的速调管在 50 W 微波输入的情况下，最大输出功率可达到 7.5 MW。达到预期加速梯度大约要求输出功率在 3.8 MW 足够。高压调制器用于将市电转化为百千伏的脉冲高压以驱动速调管。速调管工作时，高压调制器在其阴极与阳极之间加载上百千伏的脉冲高压，为电子加速提供能量，因此，其也是微波的能量来源。高压调制器输出电压的抖动将影响电子的能量，进而影响速调管电子的飞行时间，最终导致速调管输出的高功率微波相位的抖动。同时，电子能量的抖动也会导致微波功率的抖动。所以高压调制器输出高压的稳定性是很重要的指标。以上海交通大学兆伏特超快电子衍

射装置所使用的全固态高压调制器 (solid-state modulator) 为例, 其能够输出 120 kV 高压, 稳定性达到 30 ppm<sup>11</sup>。目前华中科技大学正在开展的兆伏特超快电子成像装置所采用的高压脉冲调制器参数为输出电压约 138 kV、重复频率 1-50 Hz、脉冲平顶时长  $\geq 5 \mu\text{s}$ 、脉冲平顶平坦度  $\leq 0.2\%$ 、高压重复精度  $\leq 0.05\%$ 、输出脉冲前沿抖动约  $\leq 10 \text{ ns}$ 。

**波导系统** 波导系统用于将速调管输出的微波功率馈入电子枪, 防止反射功率损坏速调管, 同时耦合相关微波功率用于低电平调节。

参考图 14.11, 微波功率在方波导内以 TE<sub>10</sub> 模式传输, 非互易性环形器 (non-reciprocal circulator) 仅允许单向的微波功率传输, 反射功率被引导到隔离端口通过负载消耗掉, 产生的热量通过外接管道水冷清除。

两个定向耦合器分别采集速调管与电子枪处的前馈与反射微波功率用于低电平系统调节。速调管端定向耦合器监测速调管的输出功率, 同时, 如果反射功率大于设定值, 低电平内的安全联锁将切断速调管输出, 防止反射功率损坏速调管; 电子枪端的定向耦合器监测馈入电子枪的微波功率, 同时, 电子枪反射回的微波功率幅值相位与加速电场的幅值相位相关, 可以作为低电平输出调节的监测对象。

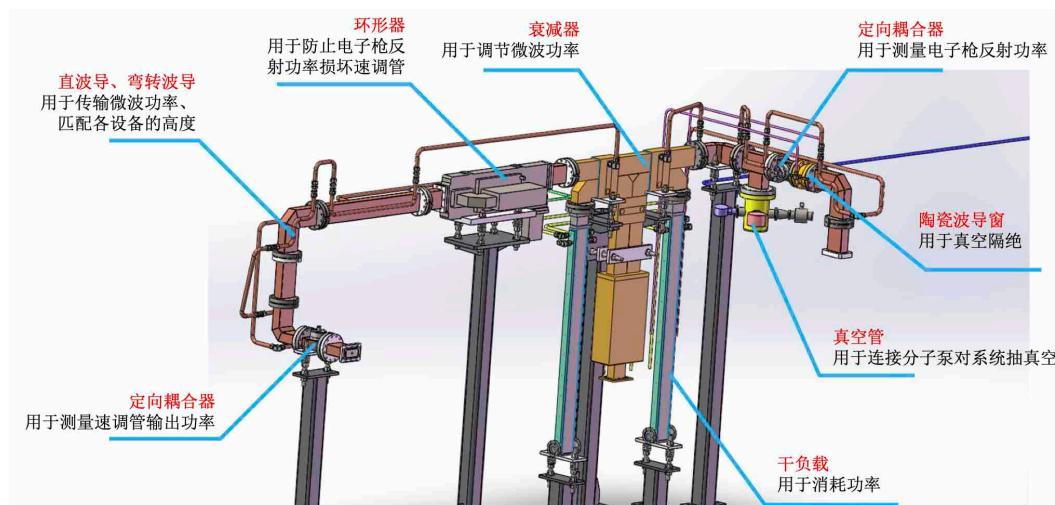


图 14.11: 波导系统。由速调管输出的微波功率通过充气波导系统传输并耦合到加速腔, 维持加速腔内的电磁场谐振状态, 并采集有关微波信号用于低电平系统控制反馈。

<sup>11</sup>这里衡量微波脉冲稳定性所采用的实用单位 ppm 为“百万分之一”, 即 parts per million, 用于量化微波脉冲源或信号的稳定性。具体而言, 它表示微波脉冲的频率或定时在一千万份中的相对变化或偏差量。在微波/射频应用中, 实现高稳定性通常对确保系统的准确性和可靠性至关重要。因此, 较低的 ppm 值表示更稳定的微波脉冲源。

### 14.3.3.2 光阴极电子枪、加速腔

电子枪的主体<sup>12</sup>由尾盘、半腔盘和整腔盘三部分组成，参考图 14.12，将腔体分成三份的原因在于可以独立改变半腔、耦合孔和整腔的尺寸，这在后续的调谐阶段尤为重要。电子枪所需的微波功率通过矩形波导馈入整腔，经由耦合孔在半腔中建场。该方案相比沿轴馈入的方案可以缩减电子枪的纵向长度，进而减少 UED 中电子束的飞行距离，抑制空间电荷效应引起的束团长度增长。但侧面馈入的方案会略微破坏电子枪的圆柱对称性，为了弥补对称性的损失，我们在馈入波导对侧设计了真空管，在抽取真空的同时补偿射频电磁场的二极分量。设计中，半腔盘和整腔盘上切削了用于填充焊料的沟槽，焊料选取金铜合金 (60% 金 + 40% 铜)，该合金具有极佳的导电性且熔点低于纯铜，在 1070°C 时融化并粘合两侧部件。尾盘、半腔盘、整腔盘和波导之间的焊接均使用该方法。

伴随着加速场梯度增加，阴极处由于场发射 (field emission) 导致的暗电流 (dark current) 也会快速增加。由于微波的脉宽一般为微秒量级，而激光在几十飞秒量级，因此，伴随着几十飞秒的光电子信号的产生，脉宽为微秒量级的暗电流本底信号也会同时产生。虽然暗电流的峰值流强比光电子低数个数量级，但是，考虑到其脉宽比光电子多数个数量级，因此，在超快电子衍射中，暗电流本底是需要特别关注的参数。对自由电子激光装置而言，暗电流可以通过后续的加速和色散元件有效地消除。但是，对超快电子成像来说，由于电子源到样品的距离较短且一般没有色散元件，暗电流的消除要困难得多。对超快电子成像装置，我们希望电子枪所产生的暗电流尽量低。一方面可以通过降低阴极的粗糙度等工艺的改善来获得；另一方面则要求电场梯度不宜太高。这是目前兆伏超快电子衍射的电子束动能一般控制在 3 MeV 左右的原因之一。关于暗电流的更多讨论将在下一节介绍。

### 14.3.4 传输段

#### 14.3.4.1 螺线管

螺线管用于提供纵向的静磁场  $B_z$ 。电子束进入螺线管时，横向发散的电子与  $B_z$  耦合后产生角向洛伦兹力，使电子束沿角向旋转，该角向速度进一步和  $B_z$  耦合形成横向聚焦力，使电子束由横向散焦变为横向聚焦。为了获得理想的轴对称性，螺线管和 1.4-cell 微波电子枪的连接处设计了法兰型的卡槽连接结构，在固定微波电子枪的同时，通过 U 型孔在  $x$  和  $y$  方向提供  $\pm 2 \text{ mm}$  的可调范围，用于电子枪和螺线管的准直调节。图中展示了螺线管的纵向磁感应强度沿纵向的分布，该螺线管中心到光阴极的距离为 0.20 m，螺线管正常运行时在光阴极位置的漏磁 < 50 Gauss，对电子束初始发射度的影响可忽略。

<sup>12</sup>由于电子自光阴极产生之后就进入加速腔，到底用“枪 (gun)”或是“腔 (cavity 或 cell)”？如果强调 (微波) 加速结构，那么用“(微波) 腔”，如果强调电子自产生至加速的整个过程与整体结构的特性时，那么用“枪”。有些较细腻区分 gun 或 cavity 的文献则是将光阴极与分数腔 (0.x cell) 合称 gun，而将整数腔 (N-cell) 单独称 cavity。由于后端加速腔可短可长，根据目标能量而定，如果后端仅包含少数几个加速腔，则整体称 RF gun；如果后端还有许多串接的加速腔，则整体称 RF injector。

由有限元仿真软件计算得到的螺线管的沿轴磁场分布，其中  $s = 0$  对应螺线管的中心位置，磁场有效长度约 0.2 m，磁场整体分布关于  $s = 0$  对称，螺线管的焦距与  $B_{\max}^2$  成反比，即通过调节  $B_{\max}$  可以控制电子束的横向焦点的位置。一般来说，螺线管的横向焦点通常选在 EMCCD 的磷光屏处，以获得最清晰的衍射样斑。

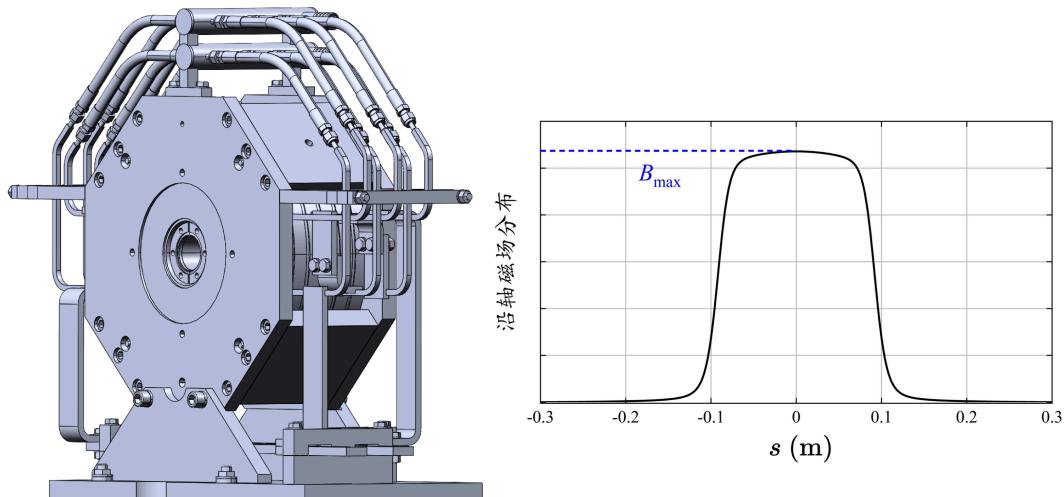


图 14.13: 螺线管设计图与沿轴磁场分布。

**磁化电子束 (magnetized beam)** 又称涡旋束 (vortex beam)。由正则角动量 (canonical angular momentum, CAM)<sup>13</sup> 守恒知道，当所考虑的物理系统具有旋转对称性、无外力矩作用、非耗散时，系统的正则角动量守恒。由此可知，如果粒子束本身不具有角动量，那么，当束团进入螺线管后，由于螺线管的边缘场，在横向  $xy$  平面尽管会旋转，离开螺线管后，同样由于螺线管的 (反向) 边缘场影响，束团将停止旋转，确保正则角动量守恒。

现在换一个场景，假设粒子束在进入螺线管之前，束团本身已经具有非零角动量——比如，在螺线管中产生带电粒子束——由于正则角动量守恒，当束团离开螺线管后，在螺线管场外将获得动能角动量 (kinetic angular momentum)。运动轨道角动量与阴极磁场强度和回旋轨道半径的关系称为布许定理 (Busch theorem)，总结如下：

#### 定理 14.4. 布许定理

单粒子的运动轨道角动量  $\rho p_\phi$  与阴极磁场强度  $\propto \Phi$  和回旋轨道半径  $\rho$  的关系有

$$L_z = \rho p_\phi + \frac{q\Phi}{2\pi} \quad (14.38)$$

其中，

- $\mathbf{L} = L_z \mathbf{e}_z$  为正则角动量
- $\rho$  为回旋轨道半径

<sup>13</sup> 正则动量 (canonical momentum)  $\boldsymbol{\pi}$  定义为  $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} + q\mathbf{A} = \gamma m_e c \boldsymbol{\beta} + q\mathbf{A}$ ，其中， $\mathbf{A}$  为向量位函数， $\mathbf{p}$  为机械动量。正则角动量定义为  $\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \boldsymbol{\pi}$ ，包含一部分与粒子动能相关的角动量与磁场相关的另一部分角动量。

- $p_\phi$  为横向角向(机械)动量
- $q$  为粒子电荷量
- $\Phi = \iint \mathbf{B} \cdot d\mathcal{S} = \iint B_z d\mathcal{S}_\perp = \oint A_\phi d\ell$  为磁通量

**证明** 利用泰勒展开，在圆柱坐标系  $(\rho, \phi, s)$  中，沿  $s$  轴旋转对称的磁场可写为

$$\begin{aligned} B_z(s, \rho) &= B_{z,0} - \frac{\rho^2}{4} B''_z + \frac{\rho^4}{64} B''''_z - \dots \\ B_\rho(s, \rho) &= -\frac{\rho}{2} B'_z + \frac{\rho^3}{16} B'''_z - \frac{\rho^5}{384} B''''''_z + \dots \\ B_\phi(s, \rho) &= 0 \end{aligned} \quad (14.39)$$

其中，' 表示对  $s$  的微分。如果用向量位函数表示，有  $A_\phi \approx \frac{\rho}{2} B_{z,0}$ 。横向正则动量可写为

$$\begin{aligned} \pi_x &= p_x + qA_x \approx p_x - \frac{qB_{z,0}}{2}y \\ \pi_y &= p_y + qA_y \approx p_y + \frac{qB_{z,0}}{2}x \end{aligned} \quad (14.40)$$

对应的正则角动量沿纵向分量有

$$\begin{aligned} L_z &= x\pi_y - y\pi_x \\ &= \rho p_\phi + \rho q A_\phi \approx xp_y - yp_x + \frac{qB_z}{2}(x^2 + y^2) \\ &= \rho p_\phi + q \frac{\Phi}{2\pi} \end{aligned} \quad (14.41)$$

其中， $\Phi = \iint B_z d\mathcal{S}_\perp = \oint A_\phi d\ell$ 。当阴极浸在螺线管中，则粒子有与生俱来的初始正则角动量  $L_z = q\frac{\Phi}{2\pi}$ 。当离开磁场区后的角动量有

$$\rho p_\phi = q \frac{\Phi}{2\pi} \quad (14.42)$$

□

将阴极浸入螺线管中 — 称 **immersed cathode** — 是产生涡旋电子束有效且灵活的方法。此外，通过将电荷剥离箔 (charge stripping foil) 浸入螺线管场中，还可以产生涡旋离子束。这两种技术都在加速器上用于产生涡旋束流。涡旋束流一般应用于手性 (chiral) 或磁性结构的研究中。



**笔记** 上面介绍的涡流束是基于经典力学的非量子化涡流束。思考一下，如何产生量子涡流束？更多讨论可参考 K. Floettmann and D. Karlovets, Quantum mechanical formulation of the Busch theorem, Phys. Rev. A **102**, 043517 (2020). <https://journals.aps.org/prapdf/10.1103/PhysRevA.102.043517>。

#### 14.3.4.2 THz 谐振腔

限制 UED 时间分辨率的主要因素是样品处电子束的束团长度和到达时间抖动，前者通过优化激光和电子枪的参数，可以将束团长度降低到 50 fs 以内，后者即便将电场幅值抖动控制到 0.1% 以内，到达时间抖动仍有约 100 fs。为了使 UED 的时间分辨率突

破到 100 fs 以内，研究者提出通过同源泵浦激光产生 THz 电磁场驱动 THz 谐振器，被驱动 THz 谐振器将束团压缩，同时抑制时间抖动的方案。THz 谐振器将安置在拓展腔中 ( $s = 0.75 \text{ m}$ )。

### 14.3.5 束测元件

UED 束线包含许多束流诊断部件，部分安装在螺线管之后，在三联通腔室中，参考图 14.14。三联通腔室从上游至下游包含：

- UV 腔  $\Rightarrow$  一侧通过法兰结构插入二维控制杆，提供平移和旋转调节。控制杆顶端为 45° 的反射镜，由三倍频产生的 266 nm 的 UV 激光通过控制杆对侧法兰窗口入射，经反射镜入射到光阴极。
- 束测腔  $\Rightarrow$  束测腔用于束团横向参数的测量和控制，由上部法兰接入四维控制杆，控制杆顶部安装有法拉第杯、光阑以及荧光屏。法拉第杯和荧光屏分别用于测量束团的电荷量和横向束团分布，而不同尺寸的光阑可通过刮去外围电子来控制束团的电荷量和横向参数。
- 拓展腔  $\Rightarrow$  束线功能拓展。

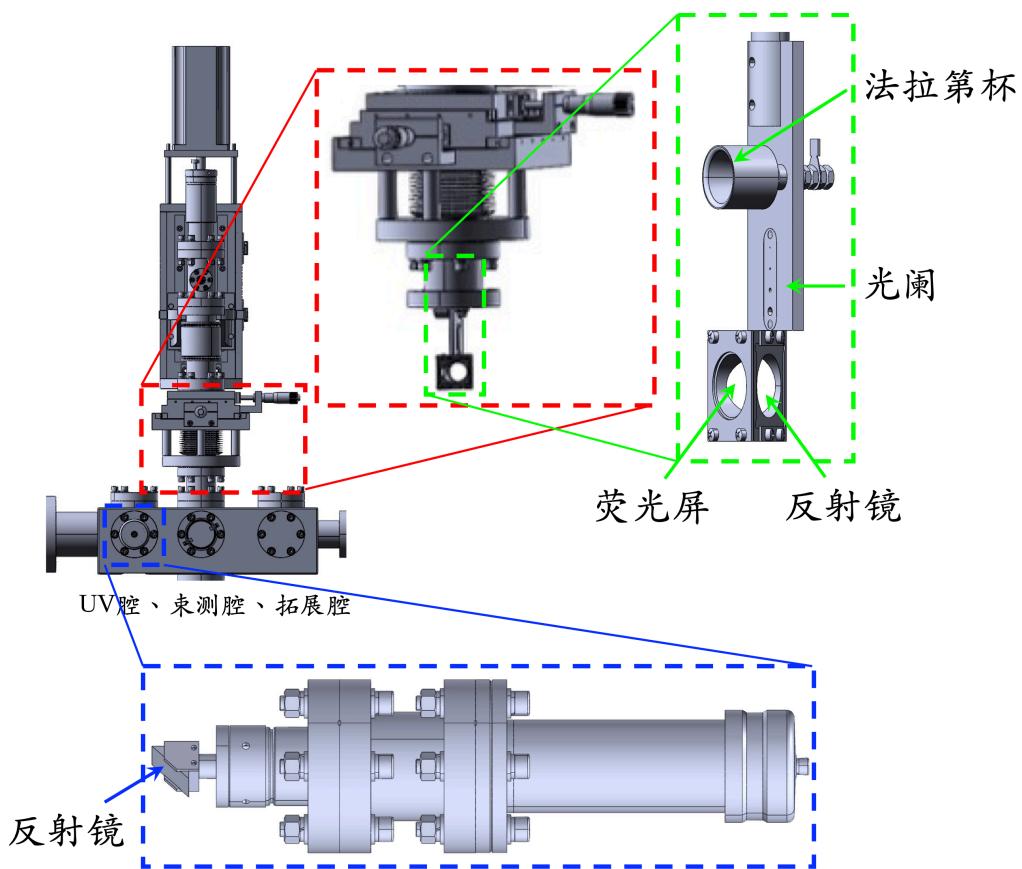


图 14.14：由左至右：UV 腔、束测腔、拓展腔。

### 14.3.5.1 法拉第杯、光阑、荧光屏

法拉第杯 (Faraday cup) 是一种在粒子加速器中用于阻断、收集粒子束，同时通过其积累的电荷/电流可用作测量带电粒子束特性的装置，是一种简单、有效的束测元件，旨在收集和测量带电粒子束的总电荷。参考图 14.15，法拉第杯的大致工作原理和在粒子加速器中的用途与要求：

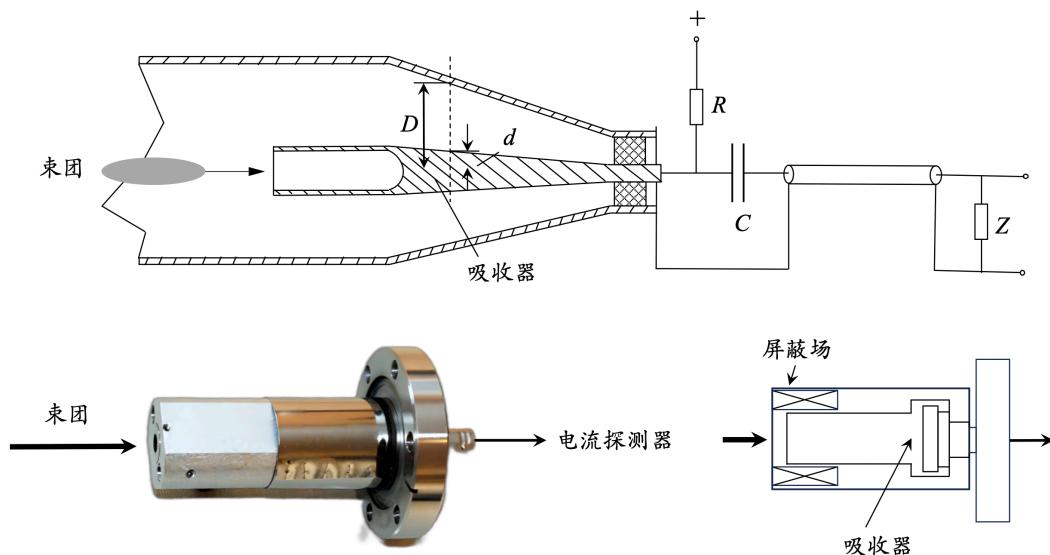


图 14.15: 同轴结构法拉第杯示意图。

- 基本设计：法拉第杯通常由一个与周围环境电气隔离的金属杯或圆筒组成，一般放置在粒子束途经路径上。
- 收集电荷：带电粒子束进入杯中时，它们会将电荷沉积到杯的表面。杯连接到外部电路，使收集到的电荷能够流出。
- 测量电流：随时间积累的电荷会在外部电路中产生电流。这个电流的大小与单位时间进入杯中的带电粒子个数成正比。通过测量这个电流，可以反推束团电流。
- 校准：通常使用已知标准对法拉第杯进行校准，建立测得的电流与实际束团电流之间的关系，从而允许使用者将测得的电流转换为对束流强度的精确测量。
- 诊断工具：法拉第杯在粒子加速器中作为基础诊断工具发挥关键作用，提供有关束团强度的实时信息，使用者能够监控和控制加速器的性能，对优化实验和确保加速器在期望的参数范围内运行非常重要。
- 稳定性和准确性。

法拉第杯的吸收层可能发生的效应，包含：多次散射、二次粒子产生。缓解二次粒子效应可以通过将法拉第杯加一偏压。

 **笔记** 对亚皮秒或飞秒电子束，仅法拉第杯不容易准确测出电流，但结合上游加速腔，或许能间接测得电子束峰值电流。

光阑又称狭缝 (slit) 或准直器 (collimator)，前者较薄，后者较厚。光阑是一种用于控制带电粒子束横向尺寸或角散 (angular divergence) 的装置，能塑造、引导粒子束团轨迹。大致工作原理、功能有：

- 控制束团尺寸：通过调整光阑的宽度与长度，并适当安排其在束团传输过程的位置，可以限制粒子束的相空间分布范围，确保仅有所需部分的粒子束到达样品室。
- 束团塑形：巧妙设计的光阑可用来对束团剖面塑形 (shaping)，根据实验要求，可使用不同类型的准直器来构建矩形、圆形或其他形状的束团。如果专门将光阑用来作为束团塑形，一般还需要考虑空间电荷效应的影响。
- 散角控制：较薄的狭缝用于控制粒子束团的散角。
- 降低背景噪声：在样品室前方放置光阑，有助于降低衍射实验中的背景噪声。通过缩小束团，能降低行为不良的电子到达样品室，提高信噪比。

在加速器束流诊断中，荧光屏 (phosphor view screen 或 fluorescent screen) 是最简单的观察束团存在的元件。荧光屏可能在固定、不变的位置，如果安装在束流传输段的末端；荧光屏可能安装在可移动支架上，如果安装在束团经过的位置。使用的荧光材料应选择在受到高能带电粒子照射时能够发射可见光的材料，将粒子携带的能量转换为可见信号，以便容易检测和分析。参考图 14.16，大致工作原理：

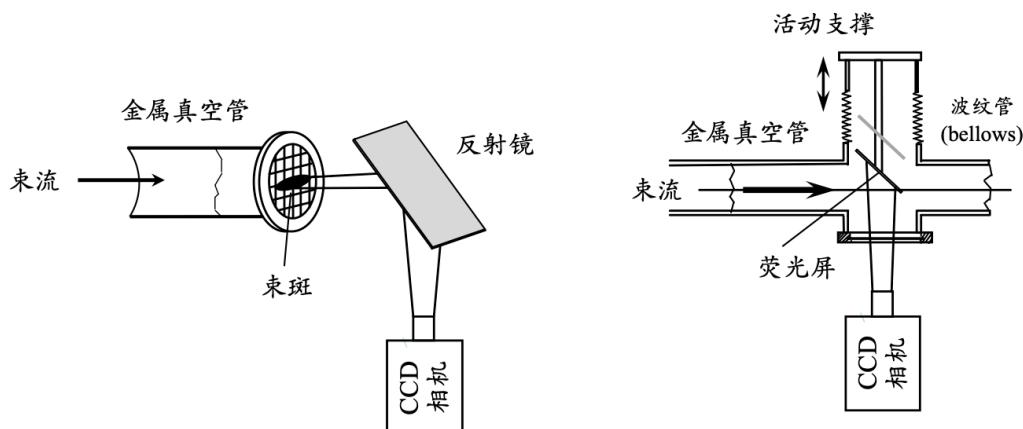


图 14.16: 荧光屏示意图。图例修改自 K. Wille。

- 检测原理：荧光体基于闪烁原理运作。当高能带电粒子（如：电子或离子）与荧光体材料发生相互作用时，它们向材料中的原子传递能量。作为响应，荧光体中的原子受激发，随后释放的能量以可见光的形式体现。
- 束团剖面监测：除了横向位置 (beam position,  $x, y$ ) 监测，荧光屏幕经常用于束团强度 (intensity) 或剖面监测 (beam profile monitor)。通过将荧光屏幕放置在粒子束途经路径中，发出的光分布提供了有关粒子束团的实空间分布的信息，对于理解和优化束团剖面非常关键，确保束团参数其满足实验要求。
- 能量测量：荧光体发出的光的强度与带电粒子沉积的能量成正比，此特性允许对入射粒子的能量进行间接测量。通过分析光的输出，能得到粒子束的能量分布。
- 材料选择：根据束测具体要求，应选择不同的荧光体材料，具有不同光产额、吸收

因子等。荧光体的选择可以影响灵敏度、响应时间和发射光的波长等因素。

产生的光在荧光屏后方安装的 CCD (Charge Coupled Device) 相机采集。CCD 相机容易受辐射损伤，因此需要适当做好屏蔽，使 CCD 处于环境背景辐射尽可能低的区域。荧光屏的响应时间一般在 ms 或更长，因此无法监测束团的纵向分布。

对 MeV UED，法拉第杯的分辨率要求  $1 \text{ pC}/0.02 \text{ s} = 50 \text{ pA}$ ，法拉第杯采集得到的电荷信号通过 BNC 同轴线传输至 Keithley 6485 皮安表 (picoammeter)。荧光体拟采用 P43 荧光粉  $\text{Gd}_2\text{O}_2\text{S}:Tb$ 。

#### 14.3.5.2 分裂环谐振腔 (split-ring resonator, SRR)

又称 loop-gap resonator (LGR)，示意图如图 14.17。一般来说，在 SRR 的应用场景中，电磁波操作频率比其结构尺寸的截止频率要低得多，因此可以采用集总元件近似。SRR 的谐振行为可由等效 LC 谐振电路解释。当 SRR 受到包含特定频率成分 — 尤其在谐振频率附近 — 的光脉冲激发后，其金属环状结构中产生交变电流，一方面使电荷交替积累在间隙一侧，形成垂直方向的时变电场，此时间隙可以视作平行板电容器 (parallel-plate capacitor)，该电容称为间隙电容  $C_g$ 。同时，环形结构中的交变电流激发磁场，因此环形结构可视为等效电感  $L$ 。此外，环形结构表面同样会积累电荷，对应环形结构的表面电容  $C_s$ 。如果考虑金属的有限电导率，则在金属表层趋肤深度内贡献表面电阻，结合时变场振荡导致的辐射损失的辐射阻抗，可以在 LC 谐振电路上串联一等效电阻，形成等效 RLC 谐振电路描述。分裂环谐振腔在这里被用来作为束测元件，但这不是唯一应用。它还可以应用在测量材料的介电系数或磁导率，通过将介电材料塞在电场较大的间隙中，或是在磁场较大的另一侧填充磁性材料，然后利用测的 SRR 谐振频率  $\omega_0$  与品质因数  $Q$  反推材料的相对介电系数或相对磁导率。

此处简短讨论 SRR 的等效电容与等效电感，给出数量级估计。当激光激励 SRR 结构时，在间隙附近的电场形成的等效电容可写成

$$C_g = \epsilon_0 \frac{\text{面积}}{\text{间隙}} = \epsilon_0 \frac{wh}{g} \quad (14.43)$$

电荷离开间隙形成电流后，在 SRR 环路上的电感可以近似看成单匝螺线管，等效电感可写成

$$L = \frac{\text{磁通}}{\text{电流}} = \frac{\mu_0 n I \cdot A_\perp}{I} = \frac{\mu_0 \cdot 1 \cdot \ell^2}{h} \quad (14.44)$$

于是，SRR 的谐振频率有

$$\omega_0 \approx \frac{1}{\sqrt{LC}} = \frac{c}{\ell} \sqrt{\frac{g}{w}} \quad (14.45)$$

留意，谐振频率与 SRR 的“长度” $h$  无关。此外，品质因数有

$$Q \approx \frac{1}{R} \sqrt{\frac{L}{C}} \quad (14.46)$$

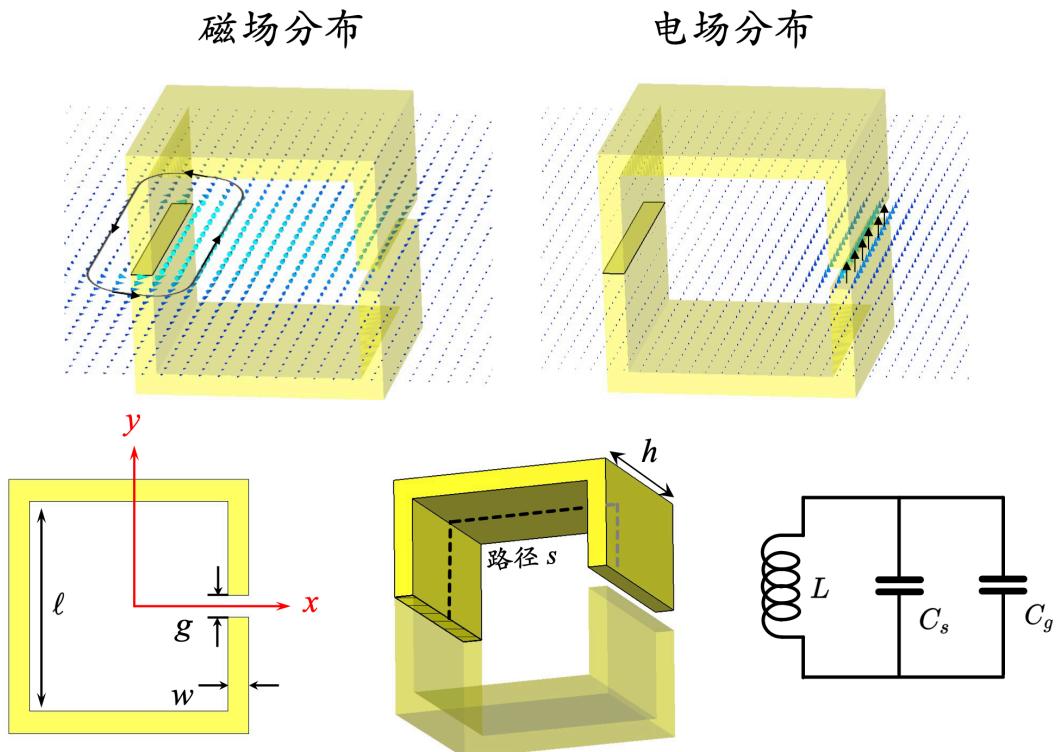


图 14.17: 分裂环谐振腔结构与等效电路图。

其中，由于金属有限电导率贡献的等效电阻有

$$R_{\text{有限电导率}} = \frac{1}{\sigma} \frac{\text{长度}}{\text{面积}} \approx \frac{4\ell}{\sigma \delta_{\text{skin}} h} \quad (14.47)$$

其中，“长度”为电荷振荡的时变电流沿着金属内侧面走的路径  $s$ ，“面积”为趋肤深度与  $h$  形成的横截面。将以上结果代入品质因数，有

$$Q \approx \frac{\ell}{2\delta_{\text{skin}}} \quad (14.48)$$

其中， $\delta_{\text{skin}} \approx \sqrt{\frac{2}{\mu_0 \omega_0 \sigma}}$ 。此估算的品质因数比起实际测量到的品质因数大，这是因为还有辐射阻抗尚未考虑；如果加入辐射阻抗贡献，则品质因数将降低。更准确的分析此处不论，感兴趣的读者请自行查找相关文献。

**练习 14.2** 大学物理学过，根据图 14.17，LC 谐振电路的谐振频率可以写成

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{L(C_g + C_s)}} \quad (14.49)$$

其中，针对特定 SRR 结构的  $C_g, C_s, L$  可以通过电磁理论推导得到。感兴趣的读者可以试着推导图 14.17 对应的等效元件参数  $C_g, C_s, L$ 。 ■

**解** 参考 Y. Song et al., Analytical model of the streaking process in a single split-ring resonator for sub-ps electron pulse, Nucl. Instru. Methods A **987**, 164861 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.nima.2020.164861> ■

THz 驱动的亚波长结构分裂环谐振腔将用作束测，原理与条纹相机 (streak camera) 或

传统射频/微波横向偏转腔 (transverse deflecting cavity, TDC) 无异，在束团行进的横向方向产生时变的偏转场，穿过该场区的电子获得的横向动量是关于偏转场相位的函数。假定束团中心在零相位穿过  $y$  方向的偏转电场，则其获得的横向动量为零，运动方向保持不变，而电子束头部和尾部分别获得  $+y$  和  $-y$  方向的横向动量，经过漂移段后可用探测屏测得电子束  $y$  方向的横向尺寸，该尺寸与电子束的束团长度和偏转场的扫描速度 (streak velocity) 有关。

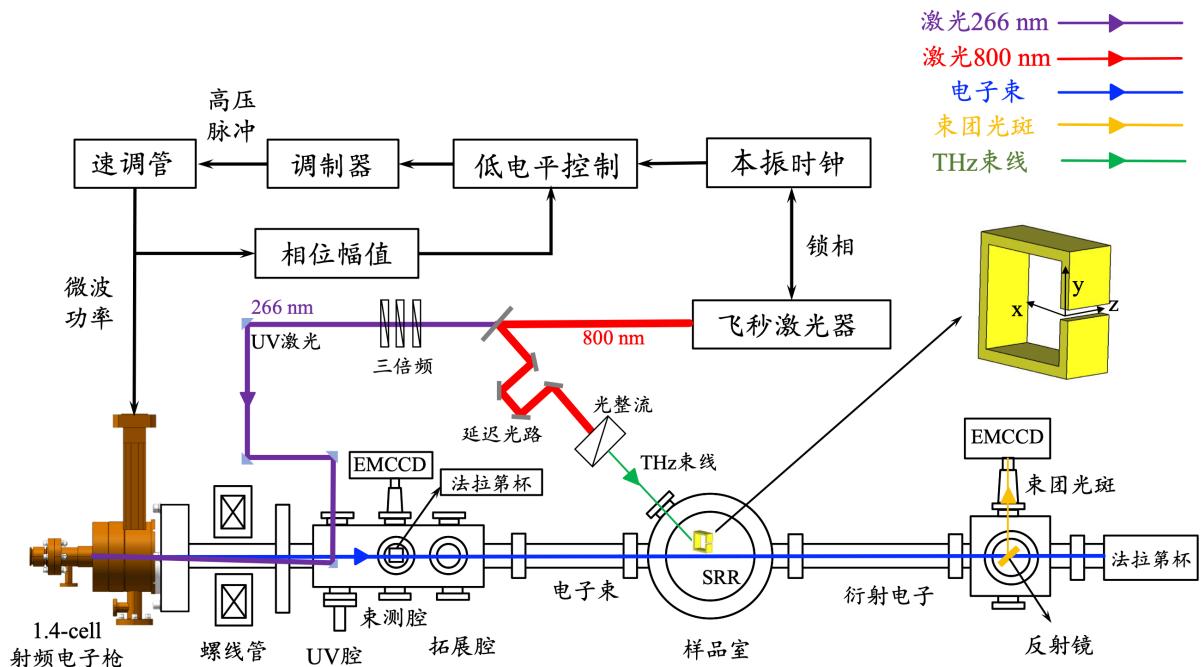


图 14.18: 分裂环谐振腔在 UED 束线中的样品室。

**偏转腔工作原理** 参考图 14.19，作为偏转腔，当操作在合适的谐振腔模式下 — 一般为  $\text{TM}_{110}$  或  $\text{TM}_{210}$  模式<sup>14</sup>，电子束团在经过时能够得到与时间或纵向坐标  $z$  依存关系的横向偏转力。在零相位附近通过偏转腔的电子束将不会产生净偏转，而仅有电子束内的粒子受到纵向与束团中心  $t$  或  $z$  成正比的横向力。细节此处不论，此处简短介绍。从洛伦兹力方程  $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$  开始，利用  $F_y = \frac{dp_y}{dt} = \gamma m_e \frac{dv_y}{dt} = \gamma m_e c^2 \frac{d^2 y}{ds^2} = \gamma m_e c^2 y''$ ，则

<sup>14</sup>一般来说，常用的谐振腔模式对应的应用有：

- $\text{TM}_{010} \Rightarrow$  粒子加速
- $\text{TM}_{110} \Rightarrow$  偏转、纵向束测、粒子束分离、对撞束团的 crabbing 等
- $\text{TM}_{210} \Rightarrow$  粒子束聚焦、提供朗道阻尼等

沿横向  $y$  方向分量有

$$\begin{aligned}
 F_y &= qE_y + qv_zB_x \approx q\beta cB_x \\
 &\propto \cos(\omega t + \phi_0) \\
 \Delta y' &= \int \frac{F_y}{\gamma m_e c^2} ds \\
 &\propto \sin(\omega t + \phi_0) = \sin[k(s - z) + \phi_0] \\
 &= \sin(k s + \phi_0) \cos k z - \cos(k s + \phi_0) \sin k z \\
 &\approx \sin(k s + \phi_0) - k \cos(k s + \phi_0) \cdot z \\
 \Rightarrow \Delta y' &= -\frac{q V_{\perp, \text{cav}}}{\gamma m_e c^2} \sin(\omega t + \phi_0)
 \end{aligned} \tag{14.50}$$

其中,  $V_{\perp, \text{cav}}$  为等效横向电压。

通过适当调整相位  $\phi_0$ , 有  $\Delta y' \propto z$ 。离开偏转腔, 漂移一段距离后, 束团的头部和尾部粒子将在横向  $y$  方向上积累相反方向的冲量, 如图 14.19 所示。在离偏转腔下游一定距离的屏幕上观察, 束团的横向尺寸  $\sigma_y$  将近似与束团通过腔室时的长度  $\sigma_z = c\sigma_t$  成正比, 有

$$\sigma_{y, \text{屏幕}} = \sqrt{\sigma_{y, \text{TDS}}^2 + \left( \frac{q\omega V_{\perp, \text{cav}} L_{\text{漂移段}}}{\gamma m_e c^2} \sigma_{t, \text{TDS}} \right)^2} \tag{14.51}$$

其中,  $L_{\text{漂移段}}$  为漂移段长度,  $\omega$  为谐振腔在该模式的共振频率。使用横向偏转腔能够观察和测量电子束的纵向长度。以上假设束团离开偏转腔后为单纯漂移段。如果不是单纯漂移段, 而是包含磁聚焦结构传输段, 则根据 §7.4,  $L_{\text{漂移段}}$  可推广写为  $\sqrt{\beta_{y, \text{TDS}} \beta_{y, \text{屏幕}}} \sin \psi_y$ , 因此有

$$\sigma_{y, \text{屏幕}} = \sqrt{\sigma_{y, \text{TDS}}^2 + \beta_{y, \text{TDS}} \beta_{y, \text{屏幕}} \left( \frac{q\omega V_{\perp, \text{cav}}}{\gamma m_e c^2} \sigma_{t, \text{TDS}} \sin \psi_y \right)^2} \tag{14.52}$$

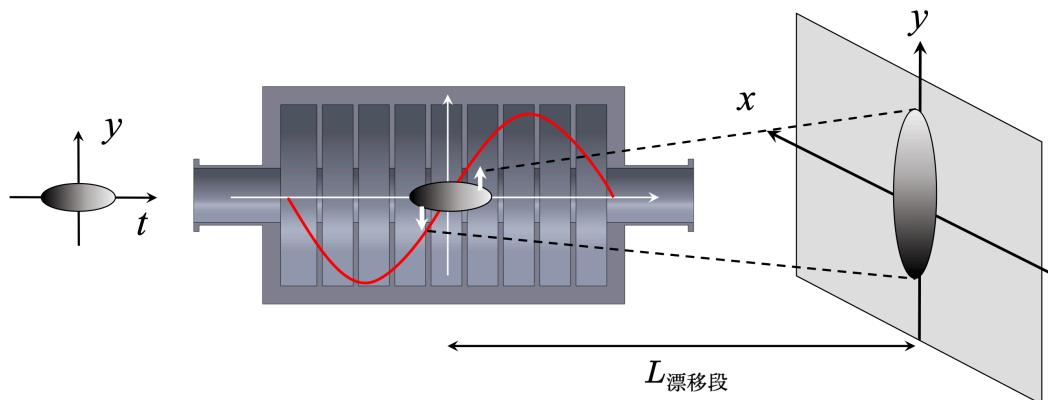


图 14.19: 射频/微波偏转腔及其束长量测示意图。

除测量束长外, 横向偏转腔也允许测量束团的电流分布  $I_b(z)$  或  $I_b(t)$ 。横向偏转腔可与横向发射度测量结合, 用来测量纵向束团切片的横向发射度, 或与光谱仪结合, 用来测量纵向束团切片的能散和电子束的纵向相空间分布。一般来说, 射频/微波偏转腔能

够测量自由电子激光和超快电子衍射装置所需的多数电子束特性。

### 14.3.6 样品室

此处主要介绍固态样品室。UED 的样品室主要用于样品的固定和方向控制，有些甚至要求具备温度控制<sup>15</sup>。样品传送结构为两段式设计，样品传送杆 A、传送杆 B 和样品室之间通过真空阀隔开。样品首先放入传送杆 A 顶端，真空封闭后将样品传递给传送杆 B，进一步抽真空后送入样品室。样品室上部为高精度六维控制平台，用于样品的固定和法向调节。

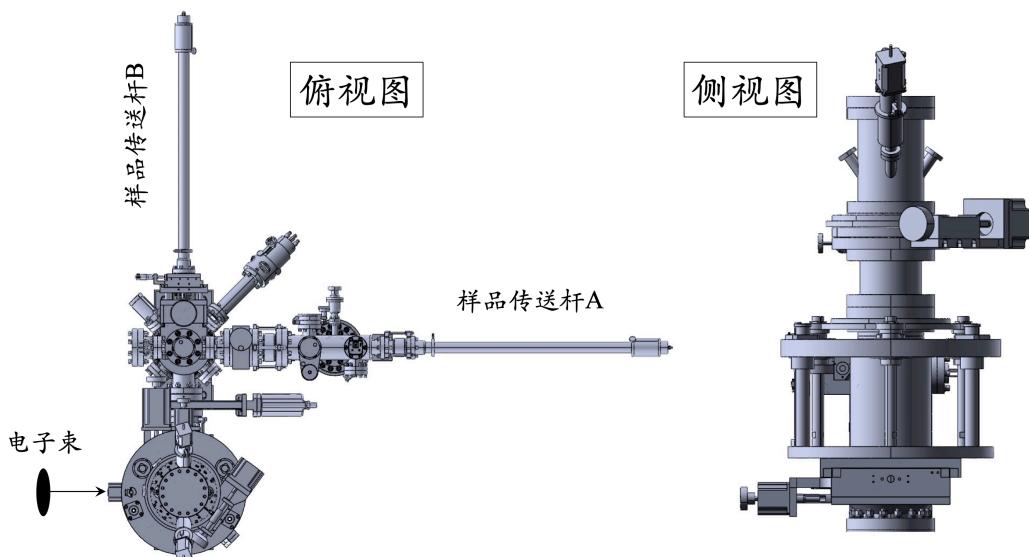


图 14.20: 样品室。

样品室中的样品先与泵浦激光作用，随后与电子束探针再作用。一般来说，调整泵浦激光与电子探针之间的延时是通过调整前者的出发时间，后者电子探针则固定不更动。固态样品一般以 3 mm 直径电镜网格作为支撑，样品“横向”尺寸一般与电子束尺寸差不多，在 100 μm 量级，“纵向”尺寸—即厚度—则约 100 nm 或更薄。样品室中还会安装监测电子束与激光束的屏，用来确认泵浦激光与电子探针是否在空间位置重合。粗略来说，UED 对样品制备的要求比对 UXD 要高。

气态样品室则不太一样。对气态样品，需要注意维持样品室与电子束经过路程的真空管道间的真空。对多数情况，气态样品室的真程度大概维持在  $10^{-4}$  Torr，金属真空管道的真程度大约  $10^{-8}$  Torr，中间过渡段大约控制在  $10^{-6}$  Torr。由于不需要考虑样品的旋转，对气态样品的控制平台的要求低于固态样品的控制平台，一般三维控制平台即足够。为了将气态样品送入样品室，一般采用连续喷嘴 (continuous nozzle 或 continuous jet) 或脉冲超声喷嘴 (pulse nozzle 或 pulse supersonic jet)，各有优缺。由于气态样品成像时间较长，需要有效屏蔽泵浦激光在样品室里打到边界产生的杂散光，一般会在样品室里安装反射

<sup>15</sup>具备制冷、加热功能，有利于观察与温度相关的相变现象等。

## 14.4 MeV UED 总体设计参数

主体包含激光、射频系统、光阴极电子枪、加速腔与预期的电子束参数。

### 14.4.1 激光系统

正在搭建的超快电子成像平台，激光扮演以下四个角色：

1. 产生探测电子束 ⇌ 通过光电效应，在阴极金属表面用紫外激光打出(光)电子；
2. 作为泵浦激光束，一般在红外波段；
3. 激发太赫兹波长结构<sup>16</sup>，作为束测元件；
4. 用作电子磁聚焦结构传输线轨迹准直。

目前采用的激光系统<sup>17</sup>包含 Vitara 种子源振荡器、脉宽展宽/压缩器、Revolution 再生放大结构、Revolution 泵浦功率源。使用啁啾脉冲放大 (chirped pulse amplification, CPA) 原理：Vitara 种子源中集成一个使用再生放大结构的钛蓝宝石振荡器，用于产生预放大的种子光。此飞秒激光器最后出口处的主要输出参数如下：

参数	数值	单位
中心波长	800	nm
脉冲宽度 (FWHM)	< 35	fs
重复频率	1	kHz
脉冲能量	> 7	mJ
平均功率	> 7	W
高斯直径	< 11	mm
光发散角	< 10	μrad
质量参数 $M^2$	< 1.25 (rms)	TEM <sub>00</sub> 模
激光高度	162	mm
偏振状态	linear, horizontal	

产生的 800 nm 飞秒激光部分可以直接用来泵浦样品。按设计，大约 1:9; 10% 用来激发产生探针(即电子束)，剩下的部分除了用来泵浦样品，还可以激发束测元件。但是，为激发出光电子，需要倍频，通过三次谐波倍频器，产生  $800/3 = 266$  nm 的激光束<sup>18</sup>。为服务上述目的，预期达到的激光束参数指标有：

<sup>16</sup>如分裂环谐振腔 (split-ring resonator, SRR)。这部分根据单个或多个 SRR 结构，需求还未有定论。

<sup>17</sup>美国相干 (Coherent) 公司，一体式再生飞秒激光放大器，型号 Astrella-Tunable-USP-1K with Revolution-65C 1KHz pump laser and with 240VAC/50Hz Air cooled chiller，一种 Ultrafast Ti:Sapphire Amplifier。要求激光器运行环境温差控制在 ±0.1°C 内，空调系统风速在 0.5 m/s 内。

<sup>18</sup>除了 800 nm 与 266 nm 外，也产生了 400 nm。

参数	阴极驱动激光	样品泵浦激光
中心波长	266 nm	800 nm
脉冲宽度 (FWHM)	< 70 fs	< 50 fs
脉冲能量	0.1 mJ	-
束斑直径	< 1.5 mm	~ 11 mm
横向偏移	< 0.1 mm	< 0.1 mm
功率稳定性	< 1%	< 1%
能量抖动	0.5% (rms)	-
光斑中心抖动	≤ 2 μm	-

描述激光光束的质量参数  $M^2$  因子<sup>19</sup>，无量纲。对于达到衍射极限的基模 TEM<sub>00</sub> 高斯激光束， $M^2 = 1$ 。一般情况下，激光束的(半)张角  $\theta$  可以与激光的波长  $\lambda$ 、在束腰位置的横向尺寸  $w$  关联，有

$$\theta = M^2 \frac{\lambda}{\pi w_0} \quad (14.53)$$

当聚焦透镜确定后，数值孔径 (numerical aperture, NA)<sup>20</sup> 决定激光束的(半)张角  $\theta$ 。结合  $M^2$ ，意味着已经决定最小束斑尺寸  $w_0$ 。

练习 14.3 利用 266 nm 激光在光阴极产生电荷量 1 pC ( $N_e = 6.25 \times 10^6$ )，初始束团长度 40 fs (rms、高斯分布)，横向尺寸  $\sigma_{r0} = 80 \mu\text{m}$  (rms、高斯分布) 的电子束。假设阴极材料为纯铜，试估算其激光强度。

解 峰值电流  $I_{\text{peak}} \approx \frac{1 \text{ pC}}{2.35 \times 40 \text{ fs}} \approx 10 \text{ A}$ ，平均电流  $I_{\text{ave}} \approx \frac{1 \text{ pC}}{1 \text{ ms}} \approx 1 \text{ nA}$ <sup>21</sup>。

首先，按 Handbook 书中 p.544 公式，激光平均功率、电子束平均电流、阴极金属量子效率 (quantum efficiency, QE)、激光波长有如下关系

$$P_{\text{laser,ave}} (\text{Watt}) = 1240.4 \frac{I_{\text{ave}} (\text{Amp})}{\text{QE} \times \lambda (\text{nm})}$$

其中，QE 取  $10^{-5}$ 。根据以上参数，给出激光平均功率  $P_{\text{laser,ave}} \approx 0.46 \text{ mW}$ 。根据 Handbook 建议，激光功率应小于 100 W。

纯铜功函数约 4.6 eV，266 nm 光子能量为 4.66 eV。要得到 1 pC 电荷量，需要的 266 nm 激光能量至少为

$$N_e \times \frac{\text{功函数}}{\text{量子效率}} = \frac{1 \times 10^{-12}}{1.6 \times 10^{-19}} \times \frac{4.66}{10^{-5}} \times 1.6 \times 10^{-19} \approx 0.47 \mu\text{J}$$

<sup>19</sup> 表征光束的实际形状与理想高斯光束形状的差异程度，决定了光束与理想高斯束的匹配程度。细节可以参考 [https://www.rp-photonics.com/m2\\_factor.html](https://www.rp-photonics.com/m2_factor.html)

<sup>20</sup> 激光入射透镜的最大入射角的正弦值， $\text{NA} = n \sin \theta_{\text{max}}$ ，其中， $n$  为透镜折射率。

<sup>21</sup> 一般而言，金属阴极能输出的平均电流极限约为 1 mA。

激光峰值功率可以估算为

$$P_{\text{laser,peak}} \approx \frac{0.47 \mu\text{J}}{130 \text{ fs}} \approx 3.6 \times 10^6 \text{ Watt}$$

假设垂直入射轰击在阴极表面，面积以  $4 \times (\pi \sigma_{r0})^2$  计，则 266 nm 激光在光阴极强度(功率密度)约为

$$I_{\text{laser}} \approx \frac{3.6 \times 10^6}{4 \times (\pi \times 80 \mu\text{m})^2} \approx 1.43 \times 10^9 \text{ W/cm}^2$$

对应的 266 nm 激光在光阴极强度能量密度有  $0.19 \text{ mJ/cm}^2$ 。 ■

**注** 面向电子加速器应用的光阴极模型，光电效应过程大多假设单光子吸收 (single-photon absorption)，忽略多光子吸收 (multi-photon absorption) 效应。一般来说，激光强度在  $\text{MW/cm}^2$  情况下，仅需考虑单光子吸收；对于激光强度高于  $10^{14} \text{ W/cm}^2$ ，则需考虑多光子吸收。

#### 14.4.1.1 射频系统

射频系统决定了微波电子枪的加速场的稳定性。使用佳能速调管 (E3772A) 提供微波功率，其峰值功率为 7.5 MW，对应加速腔的最大加速梯度为 108 MV/m。速调管的输出波形由脉冲高压调制器控制，脉冲高压调制器输出平顶波形的直流高压脉冲，该调制器实测得到的不同脉冲间的平顶波动小于 0.3% (rms)，该值对应微波电子枪中电场幅值的抖动。此外，射频系统通过本振时钟和激光锁相，当前的锁相技术预计可以使激光-射频系统间的相位抖动约束在  $\pm 0.05^\circ$  以内。射频系统的具体参数有

物理量	单位	标称值
谐振频率	MHz	2854 ~ 2858
峰值功率	MW	7.5
重复频率	Hz	250
脉冲平顶波动	1	< 0.3 % (rms)
相位抖动	deg	< 0.1 (rms)

速调管、低电平系统的部分参数<sup>22</sup>

性能	参数
工作频率	2856 MHz
电子枪重复频率	10 Hz
电子枪耦合系数	0.914
速调管输出功率	5 MW
微脉冲宽度	7.5 $\mu$ s
波导内静态真空	$< 2 \times 10^{-5}$ Pa
波导内动态真空	$< 2 \times 10^{-4}$ Pa
低电平幅度测量精度	$\pm 0.05\%$
低电平相位测量精度	$\pm 0.05\%$

#### 14.4.1.2 光阴极电子枪

以 0.1~2 pC 的电荷量为 MeV UED 中使用的典型值，可通过激光脉冲的能量调节。以铜光阴极为例，1 pC 电荷量对应的 266 nm 激光脉冲能量约为 0.05 ~ 0.5  $\mu$ J，这一能量使用商用的飞秒激光和三倍频器容易达到。更保守的估算指出，考虑 10 pC 电荷量为目标，需要的 266 nm 激光脉冲能量约为 700  $\mu$ J。为了获得更小的横向/纵向发射度，需要降低电子束的初始横向尺寸和初始束团长度，这里使用的 50  $\mu$ m 初始横向尺寸，对应商用飞秒激光器可以实现的束斑大小，50 fs 的初始长度则考虑了飞秒激光脉冲在传输过程中由于色散作用引起的激光脉冲展宽效应<sup>23</sup>。以下为目前使用的光阴极相关参数。

物理量	单位	标称值
光阴极材料	/	纯铜
功函数	eV	4.3 ~ 4.6
光阴极半径	mm	7.5
量子效率	/	$10^{-4} \sim 10^{-5}$
损坏阈值	J/cm <sup>2</sup>	0.1
真空要求	Torr	$10^{-9}$

#### 14.4.1.3 加速腔

几个重要参数：

1. 谐振频率  $f_{0,\pi} \Rightarrow$  加速场为  $\pi$  模。
2. 频率间隔  $\Delta f = f_\pi - f_0 \Rightarrow$  射频功率源的频谱有一定带宽 (bandwidth)，即使中心频率对应  $f_\pi$ ，腔中依然会存在 0-mode 成分。通过增大频率间隔  $\Delta f$ ，可有效减小 0-mode 成分。

<sup>22</sup>1 Pa = 0.0075 Torr; 1 Torr = 133.3 Pa

<sup>23</sup>待进一步量化估算确认。

3. 固有品质因数  $Q_0 = \frac{\omega\mathcal{E}}{P_d}$ , 其中,  $\mathcal{E}$  为储存在谐振腔中的电磁场能量。
4. 耦合系数  $\beta = \frac{Q_0}{Q_{ext}}$ 。表征谐振腔储存能量和外界负载的损耗功率的比值。 $\beta = 1$  为理想耦合状态, 稳态时外部功率全部导入谐振腔, 无反射功率;  $\beta > 1$  为过耦合状态, 谐振腔中电磁场的填充时间 (filling time) 较短, 但腔内电磁场在过渡到稳态前会出现幅值波动;  $\beta < 1$  为欠耦合状态, 谐振腔中电磁场填充时间长, 但电磁场会平滑过渡到稳态。
5. 场平 (field balance)  $\frac{E_{half\ cell}}{E_{full\ cell}}$ 。半腔和整腔的沿轴电场的幅值比, 理想情况下  $\frac{E_{half\ cell}}{E_{full\ cell}} = 1$ , 即半腔和整腔的沿轴电场幅值相等, 此时电子枪内电场分布均匀, 半腔和整腔中的峰值电场均能接近真空击穿阈值, 加速效率高, 且  $Q_0$  值较大。针对考虑空间电荷效应的实际情况, 可能会适当提高半腔的峰值电场。

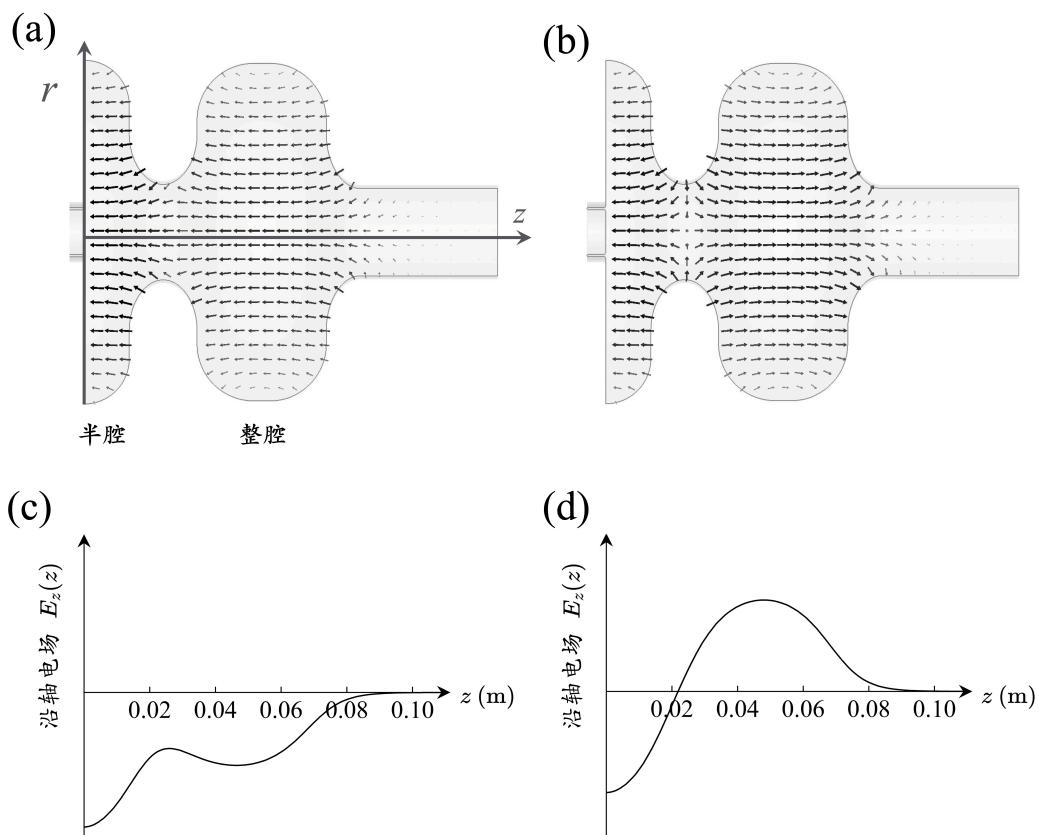


图 14.22: 加速腔的理想模型。左排图为 0-mode; 右排图为  $\pi$ -mode。

正在开展的 MeV UED 采用 S 波段 1.4-cell 腔, 有别于目前其它多数 MeV UED 使用的 S 波段 1.6-cell 腔。

**练习 14.4** 这是一个开放性的问题, 但值得思考一下: 为什么现在多数的高亮度射频光阴极电子枪采用 1.6-cell 腔? 1.6-cell 腔与 1.4-cell 腔有哪些差别? 试着从能量增益、加速梯度、加速相位、光阴极电子束的特性讨论。 ■

### 14.4.2 束流动力学：初始主体物理参数与仿真结果

主体物理参数总结如下：

参数	符号	单位	数值
沿轴电场幅值	$E_0$	MV/m	76.6
注入相位	$\phi_0$	deg	65
螺线圈峰值磁场	$B_{\max}$	T	0.13
初始束团横向尺寸	$\sigma_{r0}$	$\mu\text{m}$	80 (rms、高斯分布)、178 $\mu\text{m}$ (FWHM)
初始束团横向归一化发射度 (rms)	$\epsilon_{Nx}$	mm mrad	0.07
初始束团长度	$\sigma_{t0}$	fs	40 (rms、高斯分布)、90 fs (FWHM)
初始束团电荷量	$Q$	pC	1
末尾束团电荷量	$Q$	pC	$\approx 0.6$



**笔记** 一般 1.6-cell 腔的注入相位约为  $30^\circ$ ，而 1.4-cell 腔则约为  $65^\circ$ 。此相位选择源于对加速腔出口处的能量与相干能散 (correlated energy spread) 的同时考虑。

图 14.24 为利用 ASTRA 对束团电子沿 UED 束线跟踪模拟给出的结果。



**笔记** 参考图 14.24，束团形状从光阴极开始的松饼状束团出发后，在传输过程中，形状怎么演变？此例大致维持松饼状，但有些装置会从松饼状束团演化为球形束团，甚至雪茄状束团。

UED 在安装和运行过程中存在多种误差和抖动，因此，实际性能与仿真结果相比会有一定程度的波动和恶化。可以在以上理想化结果基础上，在仿真中对于几个运行参数引入误差项，定量分析各误差项对 UED 性能的影响。UED 束线的主要误差来源包括以下四项

- 束团质心偏移  $\Leftarrow$  源自安装过程中螺线管和电子枪的对准误差、部分源于激光的指向误差和抖动；
- 加速电场幅值抖动  $\Leftarrow$  源于射频系统的功率抖动；
- 注入相位抖动  $\Leftarrow$  源于射频-激光系统的同步抖动；
- 电荷量抖动  $\Leftarrow$  源于激光脉冲的能量波动。

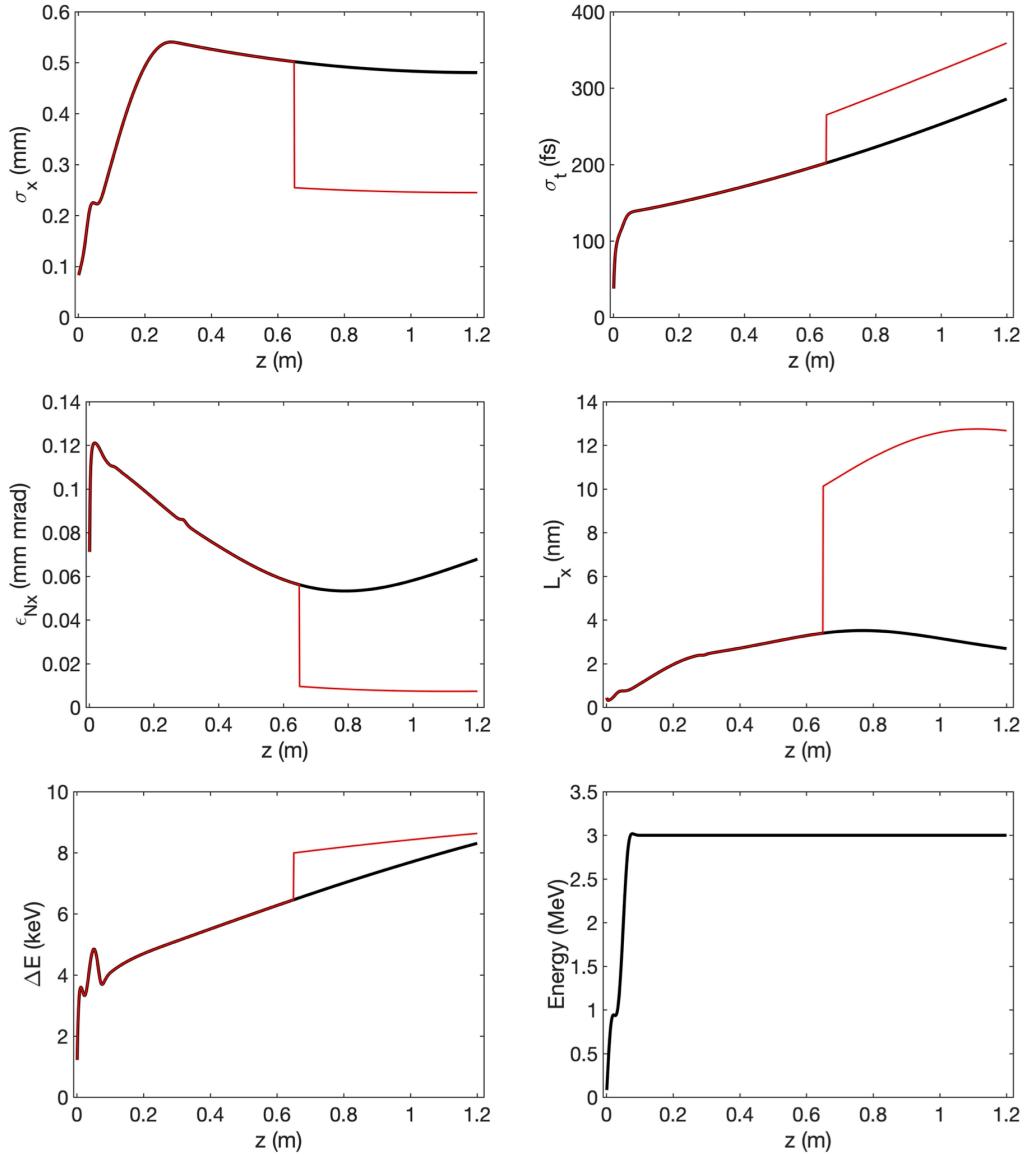


图 14.24: MeV UED 仿真结果。图中黑色曲线为无光阑情况，红色曲线为考虑在 0.65 m 处放置直径为 1 mm 光阑情况。束团横向尺寸  $\sigma_x$  与纵向长度  $\sigma_t$  皆为 rms 值，横向发射度  $\epsilon_{N_x}$  为归一化、rms 投影发射度，横向相干长度  $L_x \approx L_y$ 。

以上几个误差项预先假设的量值约为

误差项	RMS 值
束团质心偏移	0.3 mm
电场幅值抖动	0.3%
注入相位抖动	0.1°(100 fs)
电荷量抖动	0.5%

引入这些误差项后，束团长度、束团横向尺寸、中心能量和能散的相对波动在 15% 以内，影响较小。但是，对束团横向发射度和飞行时间影响很大，将使衍射样斑的清晰度显著下降。束团横向发射度增加主要源于束团质心偏移，当电子束偏离纵向  $z$  轴引出时，会受到非轴对称场的影响，造成横向发射度显著增大。束团飞行时间的波动主要由电场幅值抖动引起，部分由束团质心偏移引起。主要地，加速电场幅值抖动会转化为电子束的中心能量抖动，即每一发电子束的飞行速度均不相同，最终表现为飞行时间波动。次要地，当电子束偏离纵向  $z$  轴引出，则飞行路径的长度会根据束团质心偏移产生细微变化，同样导致飞行时间出现波动。

以横向发射度增加 10% 作为误差容忍范围，仿真结果给出对应的束团质心偏移为 0.34 mm，即 UED 系统的最大束团质心偏移不能超过 0.34 mm，对应抖动的 rms 值小于  $113 \mu\text{m}$ 。实测激光脉冲的中心抖动的 rms 值  $< 2 \mu\text{m}$ ，因此，通过减小激光光路的抖动和 UED 束线的准直误差，这一要求可以实现。

如要求飞行时间抖动控制在 50 fs 内，则射频系统每脉冲间的幅值抖动必须小于 0.05%，这对射频系统和低电平控制的精度要求极高，实现难度较大。由于采用的是 1.4-cell 腔，注入相位的斜率在工作点处为接近 0，对射频系统注入相位抖动的控制要求相对较小。

#### 14.4.3 束流动力学：暗电流仿真与评估

暗电流是指光阴极无激光照射时，由热电子及场致电子发射等产生的电流，相对于光电流来说是不需要的，称为暗电流 (dark current)。暗电流主要来自于光阴极，光阴极发射出的暗电流 — 或称寄生电流 — 的大小与光阴极材料类型、晶面、表面形貌、污染物、电场强度、腔体内真空水平和宏观脉冲长度等有关。还有部分暗电流来源于光阴极基底，阴阳电极和电子枪腔体 — 尤其是低功函数材料 — 的电子发射。光阴极电子枪的暗电流主要来自场致电子发射 (高梯度电场)。

以这一节展示的 1.4-cell 光阴极电子枪为例，图 14.25 给出光阴极电子枪各处的电场强度分布，其中，红色部分为电场强度较大区域，表征可能产生暗电流的区域。此图采用三维电磁模拟软件 CST<sup>24</sup>的本征模求解器模组计算 1.4-cell 加速腔中的电磁场。

<sup>24</sup><https://www.3ds.com/products/simulia/cst-studio-suite>

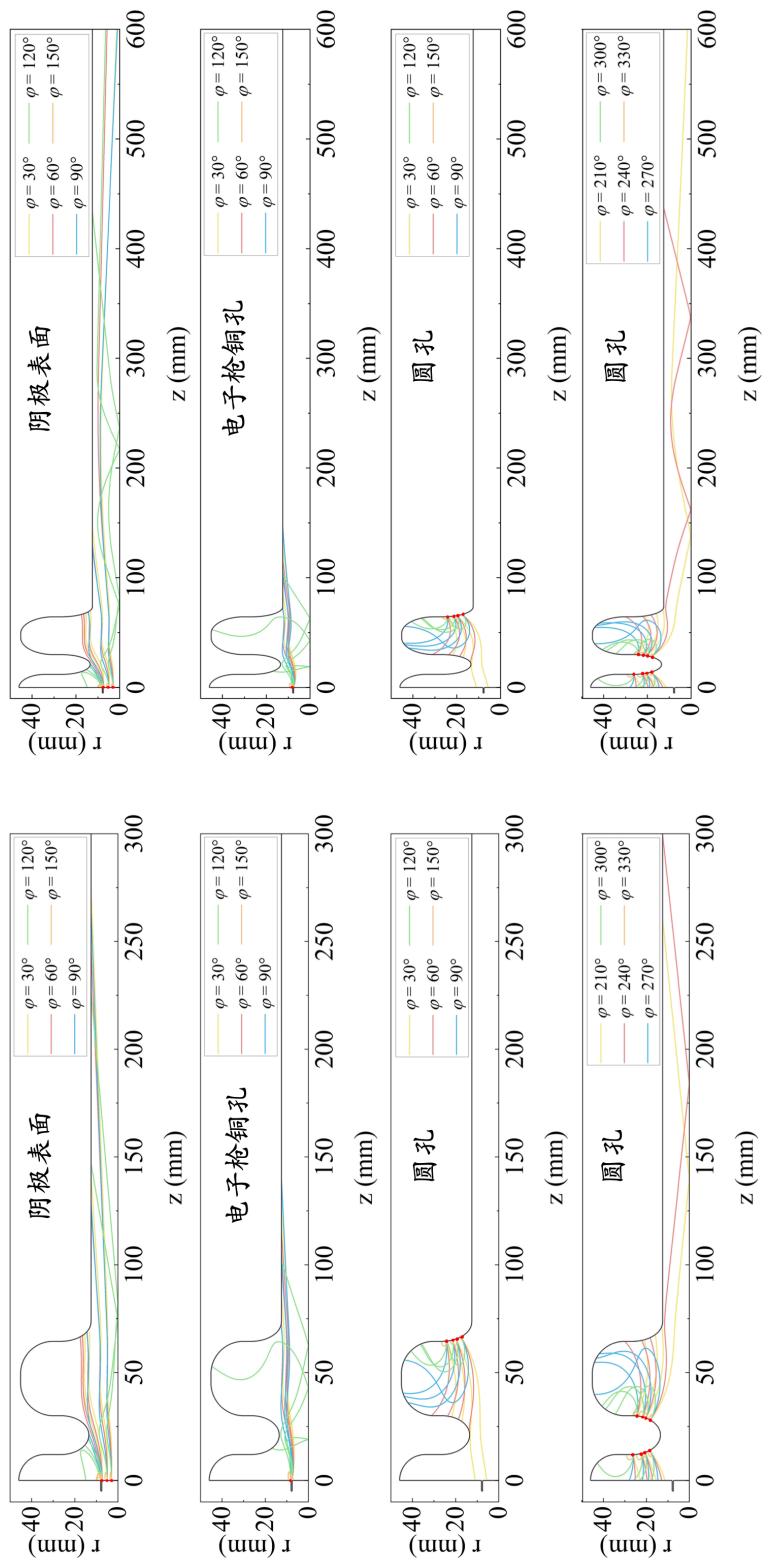


图 14.26: 光阴极电子枪的暗电子轨迹模拟, 此处  $A_e = 100 \text{ mm}^2$ ,  $\beta = 130$ ,  $\phi = 4.6 \text{ eV}$ 。

衡量暗电流的一个实用经验定律公式，称 Fowler-Nordheim 公式 (Fowler-Nordheim formula)，总结如下：

### 定律 14.2. Fowler-Nordheim 公式

此 F-N 公式用来描述暗电流值，适用于直流电子枪、常温射频枪、超导射频枪，有如下经验公式

$$I_{FN} = \frac{1.54 \times 10^{-6} \times 10^{4.52\phi^{-0.5}} A_e E^2}{\phi} \exp\left(-\frac{6.53 \times 10^9 \phi^{1.5}}{E}\right) \text{ A} \quad (14.54)$$

其中，

- $E$  为外部施加在阴极表面的电场梯度 ( $\text{V/m}$ )，
- $\phi$  为材料的功函数 ( $\text{eV}$ )，
- $A_e$  为暗电流发射有效截面积 ( $\text{m}^2$ )。

实际上，腔体表面不是理想光滑的，有些微突起；材料也不是绝对纯净的，这因素都将增大场致发射，引入一个局部场增强因子 (local field enhancement factor)<sup>a</sup>  $\beta$ ，可将场致发射电流表示为

$$I_{FN} = \frac{1.54 \times 10^{-6} \times 10^{4.52\phi^{-0.5}} A_e \beta^2 E^2}{\phi} \exp\left(-\frac{6.53 \times 10^9 \phi^{1.5}}{\beta E}\right) \text{ A} \quad (14.55)$$

一般来说，以上拟合系数的标定是通过测量一系列不同外加电场时的暗电流，利用  $C_1 E^2 \exp(-C_2/E)$  找出  $C_1, C_2$ ，再进一步论证，给出上面结果。

**注** F-N 公式的原始论文可参考 R.H. Fowler and L. Nordheim, Electron emission in intense electric fields, Proc. R. Soc. A **119**, 173 (1928). <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.1928.0091>。关于暗电流的更多介绍，可参考 R. Huang et al., Dark current studies on a normal-conducting high-brightness very-high-frequency electron gun operating in continuous wave mode, Phys. Rev. ST Accel. Beams **18**, 013401 (2015). <https://journals.aps.org/prab/pdf/10.1103/PhysRevSTA.18.013401> 或 H. Chen et al., Surface-Emission Studies in a High-Field RF Gun based on Measurements of Field Emission and Schottky-Enabled Photoemission, Phys. Rev. Lett. **109**, 204802 (2012). <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.109.204802>。

<sup>a</sup>不要与洛伦兹转换的归一化速度  $\beta = v/c$  搞混。

暗电流的影响包含：

1. 光阴极 RF 电子枪腔体的高梯度 RF 电场，场致电子发射会产生大量暗电流，导致真空系统的表面解吸附气体污染物，使真空变差和增加阴极表面光电逸出功，降低 QE，从而影响光阴极工作，特别是对真空非常敏感的半导体光阴极，会显著限制半导体光阴极寿命。
2. 高 RF 电场下大面积表面产生不同的暗电流电子束，严重限制电子枪运行。强暗电

流可能干扰光电子束检测(能散测量),甚至损害束流分析系统,影响电子束的传输,降低光电子束性能(发射度变差),次级电子发射,潜在雪崩破坏和严重辐射损害(暗电流电子束的占空比明显高于光电流电子束,暗电流会产生明显的轫致辐射,电子束通道中的辐射会破坏许多部件:分析摄像机,设备移动开关,水流速传感器和加速器部件放射性活化等)。在 FEL 中使用高加速电场梯度和长 RF 脉冲的电子枪,可与束流相比的暗电流能对束流下流的波荡器等产生损害。

3. 光阴极 SRF 电子枪中暗电流还会使腔室局部温度升高,损坏腔或超导腔体失超,需要复杂的水冷系统来维持枪的正常工作。
4. 暗电流束流被直线加速器加速,会带走很多 RF 功率。

消除暗电流的方法:

1. 大部分暗电流可由束流管道和准直器去掉,但光阴极及附近的暗电流很难去掉,因为这些暗电流与光电流很相似。许多方法被成功用来去掉或至少降低暗电流:光阴极及电极材料选择;清洗技术减少发射器数目,降低阴极与电极表面粗糙度;阴极,电极及腔体形状、尺寸优化;低电场下工作等。
2. 减小不需要的暗电流可通过各种各样调节方法;电极几何形状、尺寸优化及仔细安装:腔体结构和光阴极局部优化来完成。
3. 光阴极工作在接近最大工作电压来实现暗电流减少,并保护光阴极,但会使空间电荷效应明显增大。
4. 光阴极 RF 电子枪中缩短 RF 脉冲长度。
5. 增加光阴极附近的泵浦速率。

#### 14.4.4 射频光阴极电子枪附近的发射度增长因素与估算

以上为基于粒子跟踪模拟的数值结果,这一小节总结射频光阴极电子枪附近的发射度增长因素,并给出理论估算。

首先,通过光电效应,一般被亚皮秒 UV 激光照射后,电子从光阴极电子枪产生,产生的电子束横纵空间分布与激光脉冲横纵分布大致保持一致。基于金属光阴极产生的初始束团具有一热发射度(thermal emittance),记为  $\epsilon_{th}$ (以下将给出其表示式)。接着,在 1.x 腔的驻波加速腔中获得加速,峰值加速梯度 100 MV/m 可产生的电流密度约有  $50 \text{ A/mm}^2$ 。一般来说,  $x \approx \frac{1}{2} \pm 0.1$ 。由于电子束的初始有限束长  $\sigma_{z0}$  与有限尺寸  $\sigma_{r0}$ ,在经历加速腔过程,其非线性(假设为正弦形式)的加速梯度将一定程度导致有限的束团发射度增加,记作  $\epsilon_{RF}$ (以下将给出其表示式)。同时,在传输过程有空间电荷效应,将额外贡献一部分束团发射度,记作  $\epsilon_{sc}$ (以下将给出其表示式)。为了更好地维持电子束的亮度,一般会在加速腔出口处安置螺线管,用来在横向  $x, y$  维度同时聚焦低能量电子束。由于螺线管仅能有效聚焦满足其参考能量的一部分粒子,因此不可避免将存在色品(chromaticity)效应<sup>25</sup>。此效应将贡献一部分无法补偿的发射度增加,记作  $\epsilon_{ch}$ (以下将给出其表示式)。

<sup>25</sup>在 §7.10 介绍过,色品体现的是不同能量偏差的粒子导致不同的振荡频率。在储存环中,振荡频率以 betatron

由上讨论，束团发射度应包含本质的热发射度、RF 发射度增加、空间电荷效应导致的发射度增加、螺线管色品效应导致的发射度增加的总和。作为保守估算，忽略上述不同发射度间的可能关联，将射频光阴极电子枪出口处的电子束总发射度记为其正交和 (quadrature sum)。总结如下：

### 定理 14.5. 1.5 腔射频光阴极电子枪出口处电子束发射度公式

假设 1.5 腔射频光阴极电子枪，忽略导致不同发射度间的原因的可能联系，将射频光阴极电子枪出口处的电子束横向总归一化发射度记为

$$\epsilon_N = \sqrt{\epsilon_{th,N}^2 + \epsilon_{sc,N}^2 + \epsilon_{RF,N}^2 + \epsilon_{ch,N}^2} \quad (14.56)$$

其中，

- 归一化热发射度  $\epsilon_{th,N}$  有

$$\epsilon_{th,N} = \sigma_{x0}\sigma_{x'0} = \sigma_{x0}\sqrt{\frac{\hbar\omega - \Phi_{eff}}{3m_e c^2}} \quad (14.57)$$

其中， $\Phi_{eff} = \Phi_w - \Phi_{Schottky}$  为等效功函数 (work function)， $\Phi_w$  为金属功函数， $\Phi_{Schottky}$  为肖特基功函数<sup>a</sup>。对一般纯铜光阴极材料与 UV 激光，产生的归一化热发射度约  $(0.5 \sim 1) \text{ mm-mrad/mm}$ ，其中 mm 表 UV 激光的横向 rms 单位尺寸。

- 经过加速腔引起的 RF 纵向归一化发射度  $\epsilon_{z,RF,N}$  有

$$\epsilon_{z,RF,N} = \sqrt{3}(\gamma - 1)k^2\sigma_{zf}^3 \quad (14.58)$$

其中， $k = 2\pi f_{RF}/c$  为 RF 波数， $\sigma_{zf}$  为加速腔出口处的束长，可写成  $\sigma_{zf} = \frac{1}{k}\sqrt{\langle\Delta\varphi_f^2\rangle}$ ，其中，

$$\Delta\varphi_f = \Delta\varphi_0 - \frac{\cos\varphi_0}{\alpha\sin^2\varphi_0}\Delta\varphi_0 \quad (14.59)$$

引起的能散增加有  $\sigma_{\gamma,f} = \sqrt{\langle\Delta\gamma^2\rangle} = \alpha k \sigma_{zf}$ 。

- 经过加速腔引起的 RF 横向归一化发射度  $\epsilon_{RF,N}$  有

$$\epsilon_{RF,N} = \frac{k^3\alpha}{\sqrt{2}}\sigma_{x0}^2\sigma_{zf}^2 \quad (14.60)$$

其中， $k = 2\pi f_{RF}/c$  为 RF 波数， $\alpha = \frac{|e|E_{pk}}{2mc^2k}$ ， $E_{pk}$  为 RF 峰值电场 (一般  $\alpha \geq 1$ )， $\sigma_{x0}, \sigma_{zf}$  分别为初始横向尺寸与出口处的纵向束长<sup>b</sup>。

- 空间电荷效应引起的横向归一化发射度  $\epsilon_{sc,N}$  有

$$\epsilon_{sc,N} = \frac{c}{8\alpha f_{RF}} \frac{I}{I_A} \frac{\sigma_{zf}}{(3\sigma_{x0} + 5\sigma_{zf})} \quad (14.61)$$

其中， $I$  为峰值电流， $\sigma_{x0}, \sigma_{zf}$  分别为初始横向尺寸与出口处的纵向束长。

tune  $\nu_\beta$  或  $\omega_\beta$  描述。在螺线管中，色品效应体现在束团中不同能量偏差的粒子导致不同的拉莫尔 (Larmor) 频率  $\omega_L$ 。

- 经过螺线管引起的 RF 横向归一化发射度  $\epsilon_{ch,N}$  有

$$\epsilon_{ch,N} = \sigma_{\gamma,f} K_{sol}^2 L_{sol} \sigma_x^2 \quad (14.62)$$

其中,  $K_{sol} = \frac{\omega_L}{c} = \frac{|e|B_{sol}}{2\gamma m_e c}$  为螺线管场强,  $L_{sol}$  为螺线管等效长度,  $\sigma_x$  为螺线管入口处的束团尺寸。

**证明** 在电子加速器领域, 光阴极电子从金属表面产生的更细致的、经典的模型有三步模型 (three-step model), 感兴趣的读者可参考 David H. Dowell and John F. Schmerge, Quantum efficiency and thermal emittance of metal photocathodes, Phys. Rev. ST Accel. Beams **12**, 074201 (2009). <https://journals.aps.org/prab/pdf/10.1103/PhysRevSTAB.12.074201> 及其勘误论文<https://journals.aps.org/prab/pdf/10.1103/PhysRevSTAB.12.119901>。关于射频光阴极电子枪的电子动力学, 更多讨论可参考经典论文 Kwang-Je Kim, RF and space-charge effects in laser-driven RF electron guns, Nucl. Instrum. Methods A **275**, 201-218 (1989). [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(89\)90688-8](https://doi.org/10.1016/0168-9002(89)90688-8)。

**注** 如果已知光阴极表面的粗糙结构, 则表面粗糙度导致的发射度增加有

$$\epsilon_{roughness,N} = \sigma_r \sqrt{\frac{|e|\pi^2 a^2 E_{RF} \sin \theta}{2m_e c^2 \lambda}} \quad (14.63)$$

其中,  $\sigma_r$  为激光尺寸,  $E_{RF}$  为外部峰值电场,  $\theta$  为激光场与 RF 加速场的相对相位,  $a$  为粗糙表面的非均匀振幅,  $\lambda$  为粗糙表面的起伏特征波长。可进一步将此加入估算, 则横向总归一化发射度有

$$\epsilon_N = \sqrt{\epsilon_{th,N}^2 + \epsilon_{sc,N}^2 + \epsilon_{RF,N}^2 + \epsilon_{ch,N}^2 + \epsilon_{roughness,N}^2} \quad (14.64)$$

细节可参考 Z. Zhang and C. Tang, Analytical study on emittance growth caused by roughness of a metallic photocathode, Phys. Rev. ST Accel. Beams **18**, 053401 (2015). <https://journals.aps.org/prab/pdf/10.1103/PhysRevSTAB.18.053401>。

<sup>a</sup>肖特基效应 (Schottky effect): 当电子由金属电极向真空或介质空间发射时, 由于金属-介质两者界面可能存在势垒, 如果还有外加电场, 则可使势垒下降, 使电子更容易发射, 此效应又称肖特基势垒降低效应。由于光阴极表面附近紧接加速腔, 因此对高梯度光阴极电子枪, 此效应必须考虑。

<sup>b</sup>在加速腔中的束团横向尺寸变化不是太大, 因为加速腔的长度尺度一般较短。 □

由上可以看到, 束团经历加速腔期间, 束长可能压缩或拉伸, 视相位而定。假设初始束长所占 RF 相位为  $\sigma_{z0} = \frac{1}{k} \sqrt{\langle \Delta\varphi_0^2 \rangle}$ , 则在加速腔出口处, 有

$$\Delta\varphi_f = \Delta\varphi_0 - \frac{\cos\varphi_0}{\alpha \sin^2\varphi_0} \Delta\varphi_0 \quad (14.65)$$

可以看到, 在束团在加速腔中当相位在  $0 < \varphi_0 < \pi/2$  或在  $\pi/2 < \varphi_0 < \pi$  时, 束长将分别压缩或拉伸。此处假设加速腔中的 RF 场为正弦形式驻波,  $E_z = E_0 \cos kz \cdot \sin(\omega t + \phi_0)$ 。

结束这一小节前, 我们说明一下, 这里的束团发射度为投影发射度 (projected emit-

tance), 又称相关发射度 (correlated emittance)。意思是, 这里所量化的发射度其实是束团分布受到各种效应影响后, 其纵向切片的许多子束团 (beamlet) 经历 (些微) 扭曲变形后, 体现在束团整体的总发射度。在不违反 Liouville 定理前提下, 这种相关发射度能够一定程度上矫正、优化, 而使传输段末尾出口处的束团发射度最小。这个过程称发射度补偿 (emittance compensation), 是直线加速器或单次经过强流加速器为了维持束团品质常见的手段。感兴趣的读者可自行查阅相关文献, 细节此处不论。

## 14.5 射频光阴极高亮度电子动力学

上一节根据 MeV UED 的总体设计参数，给出了束流动力学的数值模拟结果。但对背后的物理图像或许还不是非常清楚，这一节进一步探讨射频光阴极高亮度电子束的动力学演化过程，先从不考虑空间电荷效应的单粒子动力学开始，再考虑包含空间电荷效应的影响。这一节介绍的理论模型相对简单，下一节将介绍更完整的模型。

### 14.5.1 单粒子动力学

这一小节将依序拆分几个部分。先总结第 1 章曾经介绍过的谐振腔内的电磁场。据此，写出一组简化的纵向单粒子运动方程，包含能量与相位物理量。接着，讨论由于加速过程引起的束长变化。最后，讨论射频电磁场与螺线管磁场对束团的一些效应，包含能散、横向发射度等。留意，除非特别声明，否则假设从光阴极电子枪产生的电子束非磁化束。

#### 14.5.1.1 谐振腔电磁场

如果圆柱对称中心轴上驻波形式的电场空间分布  $E_z(\rho = 0, \phi = 0, z)$  已知，则可通过 Maxwell 方程组，得到离轴的横纵向电磁场，有如下定理：

##### 定理 14.6. 圆柱对称谐振腔的电磁场

对圆柱对称谐振腔，已知对称中心轴上驻波形式的电场  $E_z(\rho = 0, \phi = 0, z)$ ，则对 TM 模，离轴的横纵向电磁场有

$$\begin{aligned} E_z(\rho, s; t) &\approx \left[ E_z(0, s) - \frac{\rho^2}{4} \left( E''_z(0, s) + \frac{\omega^2}{c^2} E_z(0, s) \right) \right] \sin(\omega t + \phi_0) \\ E_\rho(\rho, s; t) &\approx \left[ -\frac{\rho}{2} E'_z(0, s) + \frac{\rho^3}{16} \left( E'''_z(0, s) + \frac{\omega^2}{c^2} E'_z(0, s) \right) \right] \sin(\omega t + \phi_0) \\ E_\phi(\rho, s; t) &= 0 \\ B_z(\rho, s; t) &= 0 \\ B_\rho(\rho, s; t) &= 0 \\ B_\phi(\rho, s; t) &\approx \left[ \frac{\rho}{2} E_z(0, s) - \frac{\rho^3}{16} \left( E''_z(0, s) + \frac{\omega^2}{c^2} E_z(0, s) \right) \right] \frac{\omega}{c^2} \cos(\omega t + \phi_0) \end{aligned} \quad (14.66)$$

其中， $' \equiv \partial/\partial s$ ， $E_z(0, s)$  为轴上的纵向电场分布， $\phi_0$  为  $t = 0$  时的初始相位。

**注** 以上表示式假设单模、单频，即  $E_z(0, s; t) = E_z(0, s) \sin(\omega t)$ 。如果不是单频，则  $\omega^2 = -(-i\omega)^2 \rightarrow -\partial^2/\partial t^2$ 。

以  $E_z(s) = E_0 \cos(ks)$  为例, 则在  $\text{TM}_{010,\pi}$  模的加速腔中, 有

$$\begin{aligned} E_z(\rho, s; t) &\approx E_0 \cos(kz) \sin(\omega t + \phi_0) = \frac{1}{2} E_0 [\sin(\omega t - ks + \phi_0) + \sin(\omega t + ks + \phi_0)] \\ E_\rho(\rho, s; t) &\approx \frac{k\rho}{2} E_0 \sin(ks) \sin(\omega t + \phi_0) \\ B_\phi(\rho, s; t) &\approx \frac{\rho\omega}{2c^2} E_0 \cos(ks) \cos(\omega t + \phi_0) \end{aligned} \quad (14.67)$$

其中,  $E_0$  为峰值电场幅值。由上面第一个式子第二个等号的两项可以看到, 加速场可以看成由前向(第一项)与反向(第二项)以  $\pm\omega/k = \pm c$  行波叠加形成的驻波。

### 14.5.1.2 能量增益

按 Eq. (14.67), 假设光阴极在  $z = 0$  处。当粒子在  $t = 0$  时刻, 如果看到  $\phi_0 = 90^\circ$  相位, 将感受到最大加速场。定义相位

$$\phi(s, t) = \omega t - ks + \phi_0 \quad (14.68)$$

则加速电场可写成

$$E_z(s, \phi) = \frac{1}{2} E_0 [\sin \phi + \sin(\phi + 2ks)] \quad (14.69)$$

当粒子与上式第一项  $\phi$  同相时, 上式第二项的效应可视为加速振幅的变化, 一般伴随两倍的变化频率。当加速腔操作在驻波模式时, 以上两项都会影响粒子动力学; 当加速腔操作在行波模式时, 只有同步项(第一项)会影响粒子动力学。

根据上一小节总结的谐振腔内的电磁场, 可以写出一组纵向单粒子运动方程, 包含能量与相位。能量方程可以通过洛伦兹力方程得到, 有

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = -eE_z(\rho, s; t)\beta c \Rightarrow \frac{d\gamma}{ds} = -\frac{eE_0}{2m_e c^2} [\sin \phi + \sin(\phi + 2ks)] \quad (14.70)$$

相位方程与粒子在不同位置  $s$  经历的时刻  $t(s)$  相关, 由粒子瞬时速率关联, 有

$$\frac{dt}{ds} = \frac{1}{c\beta(s)} = \frac{\gamma}{c\sqrt{\gamma^2 - 1}} \quad (14.71)$$

于是, 有

$$\begin{aligned} \phi(s) &= \omega t - ks + \phi_0 \rightarrow k \int_0^s \left( c \frac{dt}{ds} - 1 \right) ds \\ &= k \int_0^s \left( \frac{\gamma(s)}{\sqrt{\gamma^2(s) - 1}} - 1 \right) ds + \phi_0 \end{aligned} \quad (14.72)$$

留意, 此  $\phi(s)$  为自  $s = 0$  至  $s$  积累的相位。当  $\gamma \gg 1$  时, 上式被积分函数  $\ll 1$  或  $\rightarrow 0$ 。但当粒子处于低能区间, 被积分函数将不再  $\ll 1$ 。

由此, 我们得到了能量方程与相位方程。从相位方程, 可以看到, 粒子在加速过程, 由于  $\gamma$  随不同位置  $s$  改变, 看到的加速相位也有些不同。

完整、自治地求解能量方程与相位方程需要数值计算。如果想得到解析公式，可以从一个方程开始，通过迭代得到另一个物理量的解析公式。假设在加速距离  $\Delta s = s_2 - s_1$  内，相位变化不大，先对能量方程积分，有

$$\begin{aligned}\Delta\gamma &= -\frac{eE_0}{2mc^2} \int_{s_1}^{s_2} [\sin\phi(s) + \sin(\phi + 2ks)] ds \\ &= -\frac{eE_0}{2mc^2} \frac{1}{k} \left[ \cos\phi(s) - \frac{1}{2} \cos(\phi + 2ks) \right]_{s=s_1}^{s=s_2} \\ &= \alpha \left[ \cos\phi_2 - \cos\phi_1 - \frac{1}{2} (\cos(\phi_2 + 2ks_2) - \cos(\phi_1 + 2ks_1)) \right] \\ &\approx \alpha \left\{ k\Delta s \sin\phi - \frac{1}{2} [\cos(\phi + 2ks_2) - \cos(\phi + 2ks_1)] \right\}\end{aligned}\quad (14.73)$$

其中， $\alpha = -\frac{eE_0}{2mc^2 k}$ 。这里我们假设了  $\phi_s \approx \phi_2 = \phi$  并使用了三角函数和差化积关系式。令  $s_1 = 0, s_2 = s, \Delta s = s$  且  $\gamma(s_1) = 1$ ，则有

$$\gamma(s) = 1 + \alpha \left\{ ks \sin\phi + \frac{1}{2} [\cos\phi - \cos(\phi + 2ks)] \right\} \quad (14.74)$$

对完整腔而言，粒子经历距离  $\Delta s = \lambda/2$ ，即  $2kz = k\lambda \approx 2\pi$ 。此时，如果要粒子得到最大能量增益，则一般选  $\phi = 90^\circ$ 。

 **练习 14.5** 对半腔而言，粒子经历距离  $\Delta s = \lambda/4$ ，即  $2kz = k\lambda/2 \approx \pi$ 。此时，如果要粒子得到最大能量增益，怎么选择加速相位？ ■

**解** 当  $d\gamma/d\phi = 0$  时，即  $\tan\phi = \pi/2$ 。

### 14.5.1.3 同步相位

上一小节的能量增益  $\gamma(s)$  可以进一步化简，假设加速距离很短  $s \ll 1$ ，利用

$$\begin{aligned}\cos\phi - \cos(\phi + 2ks) &= \cos\phi - (\cos 2ks \cos\phi - \sin 2ks \sin\phi) \\ &\approx \cos\phi - (\cos\phi - 2ks \sin\phi) \\ &\approx 2ks \sin\phi\end{aligned}\quad (14.75)$$

则有<sup>26</sup>

$$\tilde{\gamma}(s) = 1 + 2ks\alpha \sin\phi_{\text{eff}} \quad (14.76)$$

代入相位积分式，有

$$\phi(\tilde{\gamma}; s) = \frac{1}{2\alpha \sin\phi_{\text{eff}}} \left[ \sqrt{\tilde{\gamma}^2(s) - 1} - (\tilde{\gamma}(s) - 1) \right] + \phi_0 \quad (14.77)$$

当  $\tilde{\gamma} \gg 1$  时，定义同步相位为  $\phi_{\text{sync}}$ ，有

$$\phi_{\text{sync}} \equiv \phi(\tilde{\gamma} \gg 1; s) = \frac{1}{2\alpha \sin\phi_{\text{eff}}} + \phi_0 \quad (14.78)$$

到目前为止，我们得到了粒子经历加速过程时，同步相位随  $\tilde{\gamma}(s)$  与初始相位  $\phi_0$  的解析公式。这个式子很有用，因为它能告诉我们当束团中的不同粒子具有不同的初始相位时，经历加速过程后，不同粒子具有不同的最终相位，通过相位分布特性能够体现束

<sup>26</sup>这里将  $\phi$  写为  $\phi_{\text{eff}}$ ，可视为初始相位  $\phi_0$  经过些微修正的相位。

团横纵向特性。



**笔记** 以上分析中，将  $\gamma(s)$  化简写为  $\tilde{\gamma}(s)$  才能解析得到相位积分式的结果。

以下继续讨论前，这里说明一下，这里的相位指的是粒子相对于加速腔内电磁场的相位。由于粒子能量在经历加速过程中改变，因此相位随着  $s$  而变。当粒子能量较低时，或当粒子所处的初始相位较小时（因此粒子看到的加速梯度较小，或粒子处在  $v \ll c$  的时间较长），相位改变容易积累，最终造成束团拉伸或偏离原先设定的加速相位。对电子束来说，在连接光阴极的半腔中，由于电子能量很低，相位偏离较显著。

#### 14.5.1.4 加速过程的束长变化

通过对 Eq. (14.78) 取变分，有

$$\frac{\Delta\phi_{\text{sync}}}{\Delta\phi_0} = 1 - \frac{\cos\phi_{\text{eff}}}{2\alpha \sin^2\phi_{\text{eff}}} \quad \begin{cases} < 1, & \text{压缩} \\ > 1, & \text{拉伸} \end{cases} \quad (14.79)$$

可以看到，当  $0 < \phi_{\text{sync}} < \pi/2$  时，则比值  $< 1$ ，即束长压缩。这是因为从光阴极稍晚产生的电子——即束团尾部——看到的相位比前方电子看到的相位大，受到的加速梯度较大，于是在加速腔出口处能一定程度赶上前方电子。留意， $\phi_{\text{sync}}$  不是初始相位；事实上， $\phi_{\text{sync}} > \phi_0$ ，并且由上讨论知道，取值可能  $> \pi/2$ ，那样的话，在加速腔出口处，束团可能变成拉伸。

有些读者可能会问：如何选择  $\phi_{\text{eff}}$ ？一个（非唯一）漂亮的选法是，先考虑  $\frac{\Delta\phi_{\text{sync}}}{\Delta\phi_0} \approx 1$  情况，同时要求  $\phi_{\text{sync}} = \pi/2$ 。据此思路，满足压缩比为 1 的前提是  $\phi_{\text{eff}} \approx \pi/2$ ，满足  $\phi_{\text{sync}} = \pi/2$  则有  $\phi_0 = \frac{\pi}{2} - \frac{1}{2\alpha}$ 。于是，作为  $\phi_0$  的修正选择，可取

$$\phi_{\text{eff}} = \phi_0 + \frac{1}{2\alpha} \quad (14.80)$$

图 14.27 给出同步相位  $\phi_{\text{sync}}$  与压缩比  $\frac{\Delta\phi_{\text{sync}}}{\Delta\phi_0}$  对不同初始相位  $\phi_0$  的函数依存关系。可以看到，当  $\phi_0 > 20^\circ$  时，大致有  $\phi_{\text{sync}} > \phi_0$  的趋势。当  $50^\circ < \phi_0 < 80^\circ$  时，压缩比约为 1。



**笔记** 对  $\phi_{\text{eff}}$ ，不同文献有不同选法，甚至通过更准确的粒子跟踪模拟结果给出拟合公式，细节此处不论。

**注** 前面 §14.4 介绍过，如果要比较 1.6-cell 腔与 1.4-cell 腔有哪些差别，可试着从 0.6 或 0.4 分数腔与整数腔相比的差别所导致的能量增益与加速相位等方面讨论。

#### 14.5.1.5 射频场引致的能散、横向发射度与螺线管磁场影响

由上面讨论知道，对由光阴极同一位置产生的电子，先后出发的时间差导致看到的射频场的相位差，从而导致能量增益有些差别。束团内不同粒子的这些差别最终在加速腔出

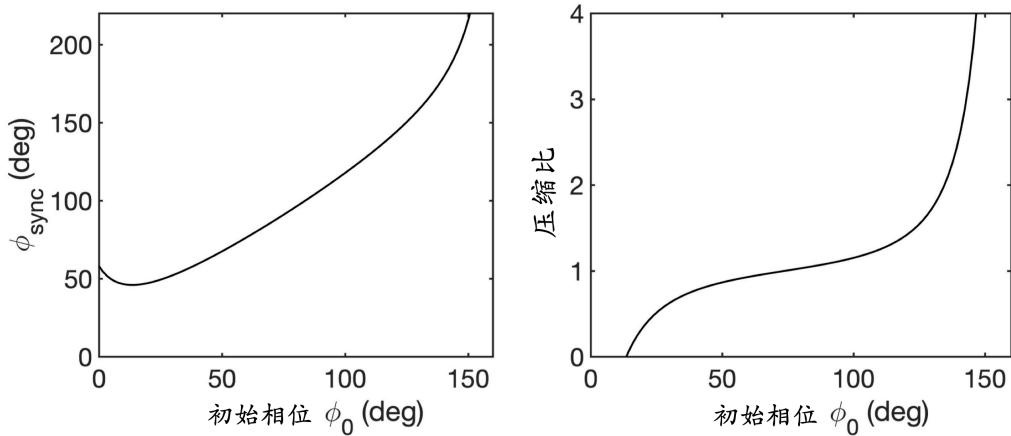


图 14.27: 同步相位  $\phi_{\text{sync}}$  与压缩比  $\frac{\Delta\phi_{\text{sync}}}{\Delta\phi_0}$  对不同初始相位  $\phi_0$  的函数依存关系。

口处将形成能散。此能散可视为投影能散 (projected energy spread) 或相关能散 (correlated energy spread)。简单起见, 以下仅说明分析思路, 不打算追求细致的能散计算。首先, 对单粒子来说, 能量增益可以写成  $\Delta E = \hat{E} \sin \phi$ 。现在, 考虑在此单粒子相位附近的其它粒子, 利用泰勒展开, 有

$$\Delta E \approx \hat{E} \left( \sin \phi + \cos \phi \Delta \phi - \frac{\sin \phi}{2} \Delta \phi^2 + \dots \right) \quad (14.81)$$

其中, 第一项为净增益, 第二项为线性相关能散, 第三项为非线性能散。当已知束团纵向分布函数  $\rho(\Delta\phi)$  之后, 可以通过包含  $\rho(\Delta\phi)$  的加权计算, 得到第二项对平均能量差异的贡献

$$\Delta \bar{E} = \int_{\text{束团延伸的相位范围}} \Delta E(\phi, \Delta\phi) \rho(\Delta\phi) d\Delta\phi \quad (14.82)$$

相关能散可以通过计算方差

$$\sigma_{\Delta E} = \sqrt{(\Delta E)^2 - (\Delta \bar{E})^2} \quad (14.83)$$

求得。

对射频场引起的横向发射度增长的估算, 分析思路类似上述。对由于先后产生的电子看到不同相位导致的效应, 通过洛伦兹力方程, 可以写出加速腔电磁场对粒子横向动量的改变有

$$\Delta p_x \approx -\frac{xe}{2c} E_0 \sin \bar{\phi}, \quad \bar{\phi} = \frac{\phi_0 + \phi_{\text{sync}}}{2} \quad (14.84)$$

类似地, 先对  $\phi$  做泰勒展开, 再通过包含  $\rho(\Delta\phi)$  的加权计算, 能得到  $\langle \Delta p_x^2 \rangle$  与  $\langle x \Delta p_x \rangle$ 。略去推导, 横向发射度增长可按下式估算

$$\epsilon_{\text{RF}, Nx} = \sqrt{\sigma_x^2 \langle \Delta p_x^2 \rangle - \langle x \Delta p_x \rangle^2} \quad (14.85)$$

其中,  $\sigma_x$  为束团横向尺寸。留意, 这里分析横向发射度增加的物理效应为先后产生的电子看到不同相位而有不同横向动量导致, 不考虑束团横向尺寸效应。由于不同横向动量, 导致在加速腔中感受到的横向聚焦/散焦强度不同, 将导致  $\sigma_x$  也会有些不同, 称色品效应。此外, 当从光阴极表面产生的电子不在加速腔对称中心轴上而存在横向偏差时, 也将贡

献额外的束团发射度。此部分分析较复杂，此处不论，感兴趣的读者可参考 K. Floettmann, RF-induced beam dynamics in rf guns and accelerating cavities, Phys. Rev. ST Accel. Beams **18**, 064801 (2015). <https://doi.org/10.1103/PhysRevSTAB.18.064801>

最后，对非磁化束 (non-magnetized beam) 情况，由于加速腔能提供的横向聚焦有限，一般在加速腔出口处会放置螺线管，利用其纵向磁场  $B_z$  在横向  $x, y$  两个方向同时聚焦。由于真实螺线管的磁场不会在螺线管的入口、出口处立刻降为零，其磁场可能延伸至加速腔内部。这些“残余”的螺线管磁场也会对电子束产生影响。完整的分析需要考虑此效应。对磁化束 (magnetized beam) 或涡旋束 (vortex beam) 情况，电子枪已经“浸泡”在螺线管中；在光阴极表面产生的电子已经携带非零角动量。不难预期，螺线管磁场的存在对非磁化束与磁化束将显著不同。这里仅简短介绍，不涉及更多讨论，感兴趣的读者应参考相关文献。

### 14.5.2 雪茄型或松饼型

上面讨论忽略了空间电荷效应的影响，如果要讨论此效应，需要先区分束团实空间分布的两种构型：雪茄型束团 (cigar beam)、松饼型束团 (pancake beam)，如图 14.28。留意，这里的两种束团构型并不对应 1.6-cell 或 1.4-cell 光阴极电子枪。以下讨论时常需要将时间尺度与空间长度对比，有

$$1 \text{ ps} \Leftrightarrow 0.3 \text{ mm} \quad \text{或} \quad 333 \text{ fs} \Leftrightarrow 100 \mu\text{m}$$

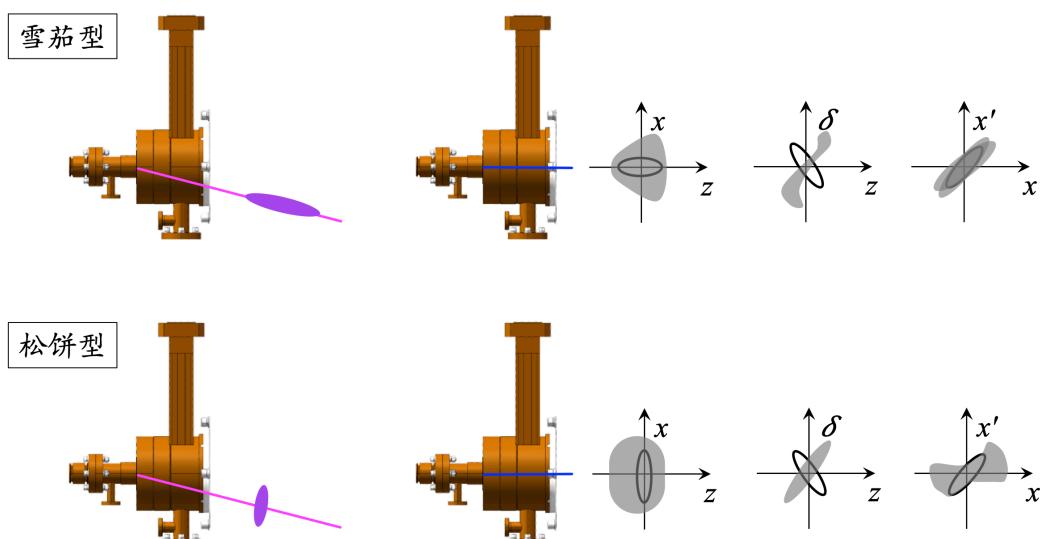


图 14.28：根据入射到光阴极上的激光横纵向尺寸比例，产生的电子束可分雪茄型束团与松饼型束团。不同的束团受到的空间电荷效应不同，在加速腔出口处的样貌也跟着改变。左侧为激光时空尺寸示意图。右侧为束团在加速腔出口处的  $(x, z)$ ,  $(z, \delta)$ ,  $(x, x')$  实空间与相空间分布示意图。图中黑线为不考虑空间电荷效应影响 (纯光学) 的结果，灰色区域则是考虑空间电荷效应的结果。下排松饼型束团随空间电荷效应演化模式又称 blow-out 区间 (blow-out regime)。

雪茄型束团的特点是横向空间电荷效应比纵向空间电荷效应显著；松饼型束团则是纵向空间电荷效应比横向空间电荷效应显著。松饼型束团随空间电荷效应演化模式又称

**blow-out 区间 (blow-out regime)**。当入射激光更接近雪茄形状时，从光阴极表面“拉”出来的电子分布会由于镜像电荷效应，相比于头部，束团尾部的电子数会相对较少。比较雪茄型束团与松饼型束团的横向分布，由于前者横向尺寸相对较小，其横向空间电荷效应相比于松饼型束团的横向空间电荷效应较为线性。对纵向空间电荷效应也有类似结果，即松饼型束团的纵向空间电荷效应尽管较雪茄型束团为显著，但相比之下较为线性。留意，

显著或不显著 ≠ 线性或非线性。

很多时候，我们不担心空间电荷效应“显著”，显著但线性，不难修正。我们更担心的是“非线性”。一旦束团经历非线性，要再修正回来就不容易了<sup>27</sup>。

### 14.5.3 1.4-cell 或 1.6-cell

常见的射频光阴极电子枪大概都是 1.x-cell 腔型，其中，分数部分的 (0.x) 为与光阴极接合部分。1.6 腔一般注入相位较小，1.4 腔一般注入相位较大。在光阴极处，注入相位与电子实际感受到的电场或加速梯度呈  $E_z(t = 0; \phi_0) = E_{z0} \sin \phi_0$  关系。因此，在同样加速梯度下，相位越大，粒子感受到的实际加速梯度越大，也就越快摆脱低能区而进入相对论区间，缓解横向与纵向空间电荷效应。换一个方式说，如果要求在腔出口处获得同样的粒子能量，意味着注入相位较大的粒子从加速腔获得的能量更多，对加速腔的负担也相对较大。对高能、大型加速器，一般采用 1.6-cell 腔；对相对低能加速器，如这里介绍的 MeV UED，采用 1.4-cell 腔或许比 1.6-cell 腔更有优势。与光阴极接合部分的分数腔越短，意味着注入相位越大，此时暗电流效应可能越明显，需要更全面的设计、分析考虑。

### 14.5.4 光阴极电荷上限

对松饼型束团，分析相对简单些。在光阴极表面施加一电场，则根据经典电磁理论，从表面能拉出的电荷上限可由高斯定律估算，有

$$E_{z0}\pi R_L^2 = \frac{Q_{\max}}{\epsilon_0} \quad (14.86)$$

其中， $R_L$  为打在阴极表面的激光横向分布有效尺寸。对高斯分布，有  $R_L = \sqrt{2\pi}\sigma_{\perp,L}$ ，其中， $\sigma_{\perp,L}$  为 rms 半径。上式还可写成如下形式

$$Q_{\max} = \frac{I_A}{c} \gamma' \sigma_{\perp,L}^2 \quad (14.87)$$

其中， $I_A = |e|c/r_e \approx 17045 \text{ A}$ ， $\gamma' \equiv d\gamma/dz$ 。此式适用于松饼型束团，对射频加速与直流高压加速机制均适用，有

$$\begin{aligned} \gamma' &\approx \frac{|e|E_{z0}}{2m_e c^2}, & \text{RF gun} \\ \gamma' &\approx \frac{|e|E_{z0}}{m_e c^2}, & \text{DC gun} \end{aligned} \quad (14.88)$$

<sup>27</sup>一般来说，要修正“非线性”效应的一个思路是，用“更非线性”的机制。

以上估算不考虑镜像电荷效应。当考虑光阴极的镜像电荷效应时，有效电场强度会由于镜像电荷的存在而减弱。因此，实际能拉出的电荷量低于此上限。

 **练习 14.6** 假设一激光束横向尺寸  $\sigma_{\perp,L} = 1.2 \text{ mm}$ ，假设激光束的纵向尺寸远小于横向尺寸，光阴极表面轴上的射频电场  $E_{z0} = 150 \text{ MV/m}$ ，估算能拉出的电荷量上限。 ■

**解**  $Q_{\max} \approx 12 \text{ nC}$ 。在实际应用中，电子枪不会操作在此极限；为了保持束团相空间特性，实际拉出的电荷量  $\ll 12 \text{ nC}$ 。当接近此极限时，束团相空间将变得扭曲，特别是能散将变大。

对雪茄型束团，由于涉及的纵向时间尺度较长，能从光阴极表面拉出的电荷上限的分析较复杂。一个简单的模型可由 Child-Langmuir 定律描述。对外部加速电压  $V_0$ ，间隙  $d$  的距离，通过求解一维泊松方程，可得体电流密度的自治解

$$J_{CL,1D} = \frac{4\epsilon_0}{9} \sqrt{\frac{2|e|}{m}} \frac{V_0^{3/2}}{d^2} \quad (14.89)$$

于是，

$$Q_{\max} = J_{CL}\pi R_L^2 \propto \frac{V_0^{3/2}}{d^2} R_L^2 \propto (E_{z0} R_L)^{3/2} \quad (14.90)$$

以上分析不涉及光阴极的材料种类，且忽略了光阴极的表面特性。目前从实验知道，对不同的阴极材料，不同的表面特性，如不同的均匀、粗糙程度等，都会影响最终能从光阴极表面拉出的电荷上限。此处不打算介绍更多，感兴趣的读者可参考 Y.Y. Lau et al., On the Child-Langmuir law in one, two, and three dimensions, Phys. Plasmas **30**, 093104 (2023). <https://doi.org/10.1063/5.0169276> 或 D. Filippetto et al., Maximum current density and beam brightness achievable by laser-driven electron sources, Phys. Rev. ST Accel. Beams **17**, 024201 (2014). <https://doi.org/10.1103/PhysRevSTAB.17.024201>。

### 14.5.5 几个实用公式

产生的电子束离开光阴极后，在加速腔内完整的动力学演化过程一般只能通过数值模拟计算，考虑空间电荷效应的话，将耗费大量计算时间或计算资源。如果不追求准确结果，则可以通过一些常用实用公式粗略估算。略过推导细节，以下基于前面介绍的 blow-out 区间，给出几个适用于射频光阴极电子枪松饼型束团的实用估算公式。

在加速腔出口处的相干能散 (correlated energy spread) 有

$$\frac{\Delta\gamma}{\gamma} = \frac{2Qc}{\sqrt{3}I_A\gamma'\sigma_{\perp,L}^2} - \sigma_\phi \cos\bar{\varphi} \quad (14.91)$$

其中， $\sigma_\phi = 2\pi\sigma_z/\lambda_{RF}$  为以 RF 射频相位占比描述的束长， $\bar{\varphi}$  为电子束的初始平均相位。等式右边第一项为空间电荷效应贡献，为正，表示束团头部增加能量，尾部减少能量，整体而言将倾向于形成正的能量啁啾，符合预期。等式右边第二项为 RF 射频场贡献，在  $0 < \bar{\varphi} < 90^\circ$  形成负的能量啁啾，在  $90^\circ < \bar{\varphi} < 180^\circ$  形成正的能量啁啾，符合预期。当束

团电荷  $Q$  太大时, 第二项的贡献将不再足够抵消空间电荷效应。一般来说, 如果离开加速腔出口处的相干能散为负值, 则下游真空漂移段的  $R_{56} > 0$  将自然地压缩束团。反之, 当离开加速腔出口处的相干能散为正值, 则下游真空漂移段的  $R_{56} > 0$  将拉伸束团。但如果下游能构造  $R_{56} < 0$  的传输段或利用另一个谐振腔调整电子束的相干能散为负, 则仍可能压缩束团。

根据以上图像, 在加速腔中的电子束长的演化可用如下公式描述

$$\left. \frac{\sigma_{\text{beam}}}{\sigma_{\text{laser}}} \right|_z = \frac{\hat{I}}{I(z)} = 1 + \Delta_{SC} - \Delta_{RF} \quad (14.92)$$

其中,  $\hat{I}$  为束团的初始峰值电流。在 blow-out 区间通常有  $\Delta_{SC} \gg \Delta_{RF} \sim \mathcal{O}(1)$ , 其中

$$\Delta_{RF} = \frac{1}{2\alpha \sin^2 \bar{\varphi}} \left( \cos \bar{\varphi} + \frac{2}{3} \cot \bar{\varphi} \right), \quad \alpha \equiv \frac{|e|E_{z0}}{2m_e c^2 k} \quad (14.93)$$

其中,  $k = 2\pi/\lambda_{\text{RF}}$  与

$$\Delta_{SC} = \frac{\hat{I}}{I_A} \frac{f(A_L, \gamma)}{(\gamma' \sigma_{\perp, L} \sin \bar{\varphi})^2} \quad (14.94)$$

这里的空间电荷形成因子 (space charge form factor)  $f(A_L, \gamma)$  有

$$\begin{aligned} f(A_L, \gamma) = A_L & \left[ 1 - \frac{1}{\gamma} + \sinh^{-1}(A_L) - \sinh^{-1}\left(\frac{A_L}{\gamma}\right) \right] \\ & + (1 - A_L) \ln\left(\frac{2\gamma}{1 + \gamma}\right) + \sqrt{1 + \frac{A_L^2}{\gamma^2}} \\ & - \sqrt{1 + A_L^2} \times \left( 1 + \ln \left[ \frac{A_L^2(1 + \gamma)}{A_L^2 - \gamma + \sqrt{1 + A_L^2} \sqrt{\gamma^2 + A_L^2}} \right] \right) \end{aligned} \quad (14.95)$$

其中, 横纵比 (aspect ratio)  $A_L = \sigma_{\perp, L}/\sigma_{z, L}$ , 下标  $L$  表激光束。

考慮 blow-out 区间, 加速腔出口处的束团电流  $I_f$  可写成

$$I_f = \frac{\hat{I}}{1 + \Delta_{SC} - \Delta_{RF}} \approx \frac{\hat{I}}{\Delta_{SC}} = \frac{I_A (\gamma' \sigma_{\perp, L} \sin \bar{\varphi})^2}{f(A_L, \gamma)} \quad (14.96)$$

可以看到, 加速腔出口处的束团电流与初始电流无关。按此模型, 决定加速腔出口处的束团电流的因素有: 加速梯度  $\gamma' \propto E_{z0}$ 、加速相位  $\bar{\varphi}$ 、入射激光束的横向尺寸  $\sigma_{\perp, L}$  与空间电荷效应  $f(A_L, \gamma)$ 。

 **练习 14.7** 对上述分析感兴趣的读者, 不妨试着画出空间电荷形成因子  $f(A_L, \gamma)$ , 研究其对激光束横纵比与电子参考能量的函数依存关系。 ■

对细节感兴趣的读者, 可参考 Luca Serafini, The short bunch blow-out regime in RF photoinjectors, AIP Conf. Proc. **413**, 321-334 (1997). <https://doi.org/10.1063/1.54425>。

**注** 留意, 加速腔出口处的束团电流是否真的与初始电流无关, 在这里的讨论属于数学或

物理模型的问题。实际上，或者在数值仿真中，是否相关，留待读者自行验证。

## 14.6 空间电荷切片束矩阵

§11.2介绍过束团内空间电荷场的计算(场动力学),这里将把重点放在空间电荷场对束团的影响(束动力学)。关于中低能 $1\sim 50\text{ MeV}$ 、高亮度电子空间电荷效应束流动力学的研究是经典、棘手的老问题。一般采用如下几种方式分析:

- 粒子跟踪模拟(ASTRA、GPT、IMPACT-T等) $\Rightarrow$ 计算费时,但可视化。
- 包络模型(envelope model) $\Rightarrow$ 束团偏离特定分布时不好处理。
- 束矩阵(beam matrix) $\Rightarrow$ 束团偏离特定分布时不好处理,虽可引入高阶矩,但大大增加分析复杂度。
- 对线性传输过程,可以证明包络模型与束矩阵为等价描述。

包络模型,顾名思义,即绕过对每个粒子在每个时刻逐个跟踪模拟,而仅将关注点放在束团的尺寸、束长等物理量在束团传输过程如何随时间演化,即考虑束团内空间电荷效应与外部聚焦场影响之后,束团在横向纵向如何膨胀。往往这些物理量没有简单的解析解,因此包络模型的目标一般不是将 $\sigma_{x,y}(s), \sigma_z(s)$ 的表示式(expression)直接写出来——因为很难直接写出来,而是试着构建这些物理量应该满足的运动方程,一般为非线性二阶微分方程。很多时候,求解这些量的运动方程需要采用数值方法才能得到。目前来说,多数研究包络模型的文献将重点放在空间电荷效应对横向束团尺寸的影响,即构造、求解 $\sigma_{x,y}(s)$ 的运动方程。少数文献关心纵向束长如何随空间电荷效应影响。

束矩阵,§7.5定义过,可以视为在包络模型的“概念”上扩展,试着将除了束团尺寸、束长以外的相关物理量纳入考虑,包含角散 $\sigma_{x',y'}(s)$ 、能散 $\sigma_\delta(s)$ 、耦合项 $\sigma_{xx',yy'}(s)$ 或 $\sigma_{xz,x\delta}(s), \sigma_{x'z,x'\delta}(s)$ 等。这么做的动机是考虑到当束团在传输过程由于空间电荷效应,在相空间表现出更复杂的演化样貌后,仅包含 $\sigma_{x,y}(s), \sigma_z(s)$ 的运动方程未必<sup>28</sup>能完整描述束团传输的动力学过程,或者,在这种情况下我们关心的不仅有束团尺寸或束长。要研究束矩阵随时间演化,就需要构造束矩阵的运动方程,一般为矩阵方程或其中二阶矩物理量的耦合运动方程组。

**注**上述无论是包络模型或束矩阵,都是对束团整体(bulk)的描述方式,都忽略了(或并未完整考虑)束团内部不同粒子间由于空间电荷效应导致的动力学差异。

这一节即将推广一种基于§7.5介绍过的束矩阵的方法,称切片束矩阵法(slice beam matrix method),针对短束团(ps至fs量级)、中低能(10 eV至10 MeV)、高亮度(pC至nC)的电子束动力学分析:适用于纵向动力学主宰的情况。

对包络模型感兴趣的读者,可参考下列经典教科书:

<sup>28</sup>这里的“未必”指的并不是说包络模型就一定无法完整描述。在多数情况下,包络模型尽管看起来只是束团尺寸的运动方程,但其内核已完整考虑了空间电荷效应。但如果涉及传输段的分段分析,包络模型就未必能完整描述包含空间电荷效应的动力学全过程。

- J.D. Lawson, The Physics of Charged-Particle Beams, 2nd ed., Clarendon Press (1988)
- R. Davidson, Physics of Nonneutral Plasmas, Imperial College Press & World Scientific (2001)
- R. Davidson and H. Qin, Physics of Intense Charged Particle Beams in High Energy Accelerators, Imperial College Press & World Scientific (2001),
- M. Reiser, Theory and Design of Charged Particle Beams, Second, Updated and Expanded Edition, Wiley-VCH (2008)

或查阅下列一些作者的相关工作:

- Elliptical cross section, uniform charge: I.M. Kapchinskij and V.V. Vladimirov (1959)
- Equivalent uniform beam: F.J. Sacherer (1971), P.M. Lapostolle (1971)
- RF photoinjector, L. Serafini and J. Rosenzweig (1997)
- Stability analysis, S. Lund and B. Buch (2004)
- Universal envelope equation, generic criterion, Hamiltonian, C.-x. Wang (2006)
- Envelope equation for multi-species, P. Sing Babu et al. (2011)
- Generalized KV in a coupled lattice, H. Qin (2009), M. Chung (2016)

对束矩阵感兴趣的读者, 则可以参考以下作者的相关工作:

- Vlasov-Maxwell, P.J. Morrison (1980)
- Ion cooling of muon collider, B. Shadwick and J. Wurtele (1999)
- Beam dynamics simulation, A. Novokhatski and T. Weiland (1999)
- Ensemble model, V-code (2004) 与一系列在加速器束流动力学应用, 不包含空间电荷效应, 推广到高阶矩
- Trace3D 开发程序 ⇒ 应用到离子束动力学研究, 包含空间电荷效应, C. Allen (2004)

粗略来说, 包络模型对解析分析更方便, 束矩阵模型更适合于数值计算。过去部分研究已在包络模型下引入纵向切片的物理图像, 有助于理解空间电荷效应动力学, 相关工作有:

- RF & space charge, K.-J. Kim (1989)
- Emittance compensation, B.E. Carlsten (1989)
- Toward SASE-FEL application, M. Ferrario et al. (2006)
- Invariant envelope solution, C.-x. Wang (2006)

⇒ 以上工作基于 包络 模型的 切片 分析, 聚焦于空间电荷的 横向 效应。

以下将介绍, 对超短飞秒电子脉冲, 着重于短束团、高亮度电子束包含空间电荷的 横向 与 纵向 效应。试着通过束矩阵分析空间电荷效应动力学, 利用纵向 切片 束矩阵 分析, 如图 14.29。

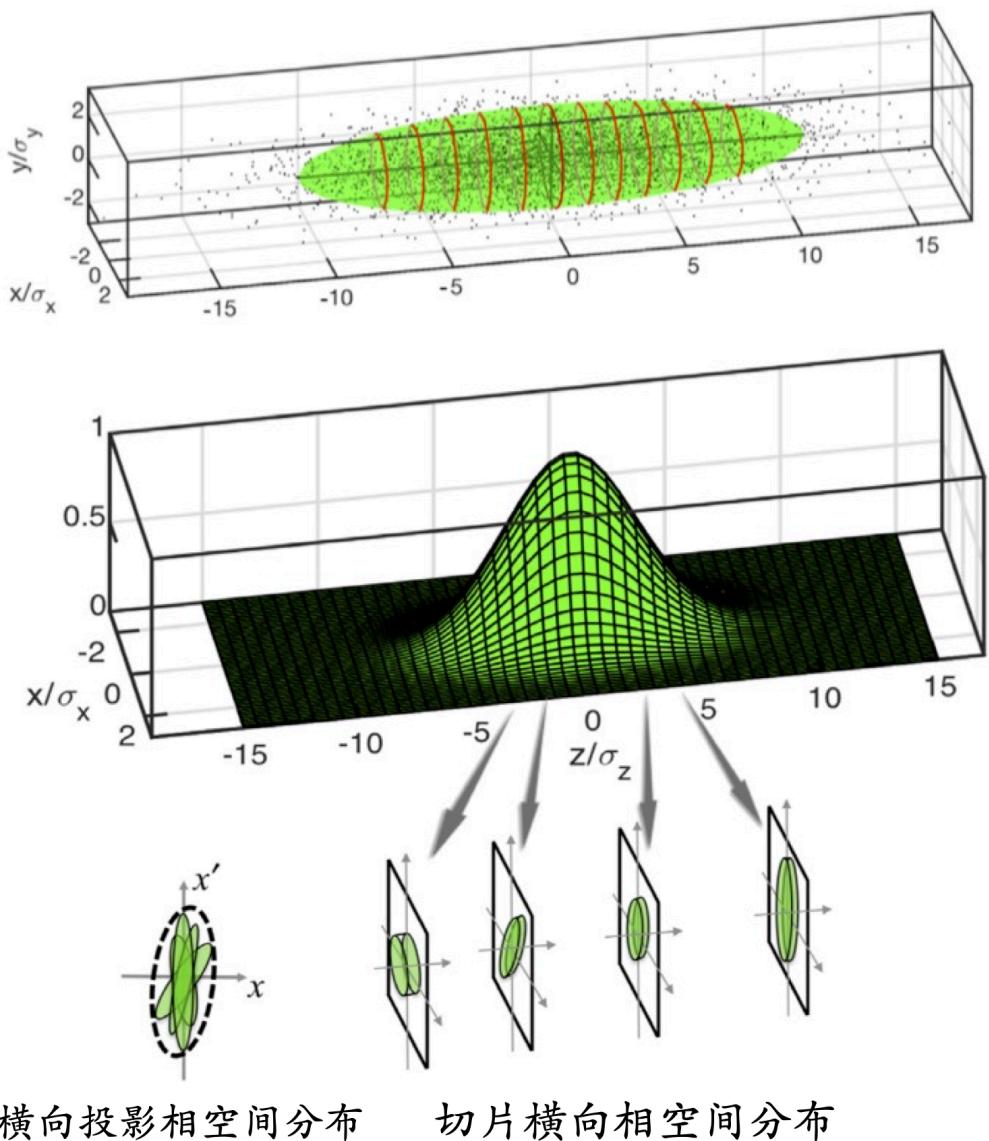


图 14.29: 纵向切片束矩阵示意图。

切片束矩阵分析的理论基础为电磁部件的传输矩阵与 Vlasov 方程的一阶、二阶矩 (moment) 方程。切片束矩阵分析的好处是，这里的电磁部件不严格限于“线性”部件，RF 腔也可以通过(线性化的)传输矩阵描述。空间电荷效应也可以通过(线性化的)传输矩阵描述。

切细一点，很多非线性系统都可能近似为线性系统]。

因此，切片束矩阵分析有几个必要元素：

- 电磁部件的切片传输矩阵描述、
- 空间电荷效应的切片传输矩阵描述、
- 建立束团整体 (bulk) 束矩阵与切片 (slice) 束矩阵的关系。

### 14.6.1 RF 腔传输矩阵

一般教科书介绍的静磁场部件的线性传输矩阵为整体 (bulk) 传输矩阵。无色散静磁场部件(如：四极铁、螺线管)的切片传输矩阵与熟悉的整体传输矩阵类似，但需要留意部件入口与出口的边缘场效应。色散静磁场部件(如：弯转磁铁)的切片传输矩阵除了留意入口与出口的边缘场效应，还要留意横纵向耦合。时变电磁场部件(如：RF 腔)的整体传输矩阵在教科书中鲜少讨论，切片传输矩阵一般则不介绍。 $6 \times 6$  切片束矩阵分析需要构建 $6 \times 6$  切片传输矩阵。RF 腔的横向 $4 \times 4$  传输矩阵采用 Gulliford & Bazarov 方法。略去数学细节，基本思路如下：

1. 假设 RF 腔在无色散区域，则 $6 \times 6$  矩阵的横向 $4 \times 4$  与纵向 $2 \times 2$  可分别独立构建。
2. 已知：纵向轴上电场分布<sup>29</sup> $\tilde{\mathcal{E}}_{z,0}(s) \in \mathbb{C}$  与  $\omega_{\text{RF}}$  假设为已知量。
3. 单粒子纵向方程

$$\begin{aligned} \frac{dt}{ds} &= \frac{1}{c\beta(s)} = \frac{\gamma}{c\sqrt{\gamma^2 - 1}} \\ \frac{d\gamma}{ds} &= \text{Re} [\tilde{\gamma}' e^{i\omega_{\text{RF}} t}], \quad \tilde{\gamma}' = e\tilde{\mathcal{E}}_z/mc^2 \end{aligned} \quad (14.97)$$

4. 引入纵向相空间坐标  $\mathbf{z} = [z \ z']^T$ ,  $z = -\beta c \Delta t$ ,  $z' = \Delta \gamma / \beta^2 \gamma^3 = \delta / \gamma^2$ , 构建纵向 $2 \times 2$  切片传输矩阵

$$\frac{d\mathbf{z}}{ds} = \mathcal{A}\mathbf{z} \Rightarrow \frac{d\mathcal{M}}{ds} = \mathcal{A}\mathcal{M}, \quad \mathcal{M} = \begin{pmatrix} M_{55} & M_{56} \\ M_{65} & M_{66} \end{pmatrix} \quad (14.98)$$

5. 假设圆柱对称结构，则完整的横向电场与磁场分布可以通过 Maxwell 方程构建

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{E}}(x, y, s) &= \tilde{\mathcal{E}}_{z,0}(s)\hat{s} - \frac{x}{2}\tilde{\mathcal{E}}'_{z,0}(s)\hat{x} - \frac{y}{2}\tilde{\mathcal{E}}'_{z,0}(s)\hat{y} \\ \tilde{\mathcal{B}}(x, y, s) &= \frac{i\omega_{\text{RF}}}{c^2} \left( -\frac{y}{2}\tilde{\mathcal{E}}_{z,0}(s)\hat{x} + \frac{x}{2}\tilde{\mathcal{E}}_{z,0}(s)\hat{y} \right) \end{aligned} \quad (14.99)$$

6. 如果还有外部纵向静磁场，则在旋转 (Larmor) 坐标分析较方便

$$\mathbf{B}_{\text{sol}}(x, y, s) = B_{z,0}(s)\hat{s} - \frac{x}{2}B'_{z,0}(s)\hat{x} - \frac{y}{2}B'_{z,0}(s)\hat{y} \quad (14.100)$$

<sup>29</sup>对完美圆柱形谐振腔，电场分布可以从解析解得到；对一般圆柱对称的谐振腔，可以利用 CST 模拟得到。

7. 从旋转坐标变换回实验室静止坐标, 考虑 RF 磁场与外部磁场的边缘场效应, 最终横向  $4 \times 4$  矩阵有

$$\mathbf{M}_{\text{RF}}(s_i \rightarrow s) = \prod_k \Delta \mathbf{M}_{\text{RF}}(s_k \rightarrow s_k + \Delta s_k) \quad (14.101)$$

8. 结合横向  $4 \times 4$  矩阵  $\mathbf{M}_{\text{RF}}$  与纵向  $2 \times 2$  矩阵  $\mathcal{M}$ , 即构建  $6 \times 6$  的 RF 腔传输矩阵。

9. 尽管 RF 腔为非线性部件, 切片传输过程仍可近似为线性传输矩阵。

对细节感兴趣的读者, 可参考 Colwyn Gulliford and Ivan Bazarov, New method for generating linear transfer matrices through combined rf and solenoid fields, Phys. Rev. ST Accel. Beams **15**, 024002 (2012). <https://journals.aps.org/prab/pdf/10.1103/PhysRevSTAB.15.024002>。

### 14.6.2 空间电荷传输矩阵 $\Rightarrow 7 \times 7$ 空间电荷传输矩阵

细分两种思路。

**思路一**: 假设束团内空间电荷场与纵向坐标无关, 采用 bulk beam model。略去数学细节, 基本思路如下:

- 先变换至束团质心, 找到束团三个特征正交基底  $\mathbf{u}$ , 计算静电位  $\phi^{\text{SC}}$ , 取梯度  $\mathbf{E}^{\text{SC}}(\mathbf{u}) = -\nabla_{\mathbf{u}}\phi^{\text{SC}}(\mathbf{u})$ , 得 space charge kick

$$\Delta \mathbf{u}'_{\text{SC}} = \frac{e}{\beta^2 \gamma^3 m c^2} \frac{\langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{E}^{\text{SC}} \rangle (\mathbf{u} - \langle \mathbf{u} \rangle)}{\langle \mathbf{u}^2 \rangle - \langle \mathbf{u} \rangle^2} \Delta s \equiv \frac{\Delta s}{f_{\text{SC}}} (\mathbf{u} - \langle \mathbf{u} \rangle) \quad (14.102)$$

其中,

$$\begin{aligned} f_{\text{SC},u_1}^{-1} &= \frac{\mathcal{K}_{\text{SC}}}{2} \left( \frac{1}{5\sigma_{u_1}^2} \right)^{3/2} R_D \left( \frac{\sigma_{u_2}^2}{\sigma_{u_1}^2}, \frac{\sigma_{u_3}^2}{\sigma_{u_1}^2}, 1 \right) \\ f_{\text{SC},u_2}^{-1} &= \frac{\mathcal{K}_{\text{SC}}}{2} \left( \frac{1}{5\sigma_{u_2}^2} \right)^{3/2} R_D \left( \frac{\sigma_{u_3}^2}{\sigma_{u_2}^2}, \frac{\sigma_{u_1}^2}{\sigma_{u_2}^2}, 1 \right) \\ f_{\text{SC},u_3}^{-1} &= \frac{\mathcal{K}_{\text{SC}}}{2} \left( \frac{1}{5\sigma_{u_3}^2} \right)^{3/2} R_D \left( \frac{\sigma_{u_1}^2}{\sigma_{u_3}^2}, \frac{\sigma_{u_2}^2}{\sigma_{u_3}^2}, 1 \right) \end{aligned} \quad (14.103)$$

其中,

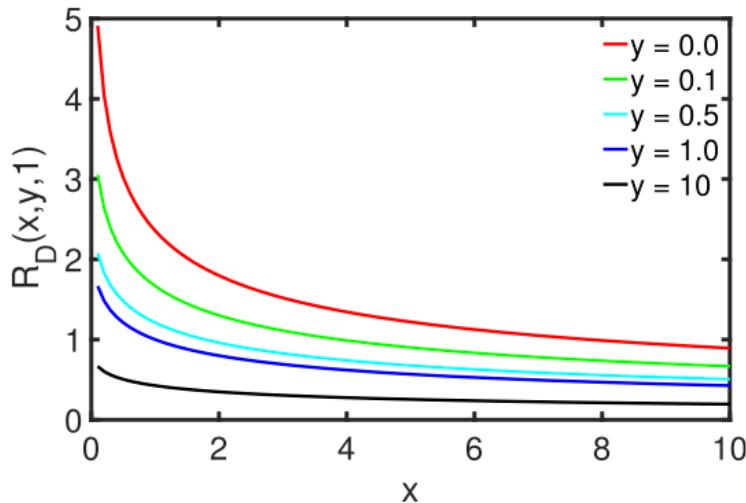
$$\mathcal{K}_{\text{SC}} \equiv \frac{Ne^2}{2\pi\epsilon_0\beta^2\gamma^3mc^2} = \frac{2I}{\beta^3\gamma^3 I_A} \quad (14.104)$$

称空间电荷导流系数 (space charge perveance), 无量纲

$$\begin{aligned} R_D \left( \frac{a}{c}, \frac{b}{c}, 1 \right) &= c^{3/2} \mathcal{R}_D(a, b, c) \\ \mathcal{R}_D(x, y, z) &= \frac{3}{2} \int_0^\infty \frac{dt}{(t+x)^{1/2}(t+y)^{1/2}(t+z)^{3/2}} \end{aligned} \quad (14.105)$$

为 Carlson 第二类椭圆积分 (Carlson's elliptic integral of the second kind), 为特殊函数, 参考图 14.30。

- 与质心相关项为偏移项  $\langle \mathbf{u} \rangle$ , 与坐标相关项  $\propto \mathbf{u}$ , 因此构成在特征轴上的  $7 \times 7$  矩

图 14.30: Carlson 第二类椭圆积分  $R_D(x, y, 1)$ 。阵  $\mathbf{M}_{\text{SC}}^{\text{eig}}$ 

$$\mathbf{M}_{\text{SC}}^{\text{eig}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta s/f_{SC,u_1} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\langle u_1 \rangle \Delta s/f_{SC,u_1} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta s/f_{SC,u_2} & 1 & 0 & 0 & -\langle u_2 \rangle \Delta s/f_{SC,u_2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta s/f_{SC,u_3} & 1 & -\langle u_3 \rangle \Delta s/f_{SC,u_3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (14.106)$$

- 从特征坐标变换回实验室静止坐标

$$\mathbf{M}_{\text{SC}}^{\text{Lab}} = \mathbf{R}^T \mathbf{M}_{\text{SC}}^{\text{eig}} \mathbf{R} \quad (14.107)$$

其中,  $\mathbf{R}$  为三个特征基底  $\mathbf{u}$  对应的旋转矩阵。

笔记 思路一 优点是不要求束团为圆柱对称且沿轴对称。

**思路二:** 当束团内空间电荷场与纵向坐标相关时, 前述模型不适用, 需重新构建。同样略去数学细节, 基本思路如下:

- 假设束团为圆柱均匀、沿轴对称, 采用格林函数法, 在半径  $b$  的理想导体圆柱管壁有静电位<sup>30</sup>

$$\varphi^{\text{SC}}(r, z) = \iint G(r, z; r_s, z_s) \rho_b(r_s, z_s) r_s dr_s dz_s$$

$$G(r, z; r_s, z_s) = \frac{1}{\epsilon_0 b} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(\beta_n r)}{\alpha_n J_1^2(\alpha_n)} e^{-\beta_n |z-z_s|} \quad (14.108)$$

- 利用  $\mathbf{E}^{\text{SC}}(\mathbf{u}) = -\nabla_{\mathbf{u}} \varphi^{\text{SC}}(\mathbf{u})$ , 可分别算出横向与纵向空间电荷场对束团的 space

<sup>30</sup>C.K. Allen, N. Brown, and M. Reiser, Image effects for bunched beams in axisymmetric systems, Part. Accel. **45** (1994) 149-165. <https://cds.cern.ch/record/1108293/files/p149.pdf>

charge kick

$$\langle \mathbf{u} \cdot \mathbf{E}^{\text{SC}}(\mathbf{u}) \rangle \rightarrow \langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}^{\text{SC}}(\mathbf{r}) \rangle \quad (14.109)$$

$$f_{\text{SC},\perp}^{-1} = \frac{2\pi\epsilon_0\mathcal{K}_{\text{SC}}}{\mathcal{Q}} \frac{\langle r E_r^{\text{SC}} \rangle}{\sigma_r^2}, \quad f_{\text{SC},z}^{-1} = \frac{2\pi\epsilon_0\mathcal{K}_{\text{SC}}}{\mathcal{Q}} \frac{\langle z E_z^{\text{SC}} \rangle}{\sigma_z^2} \quad (14.110)$$

其中,  $\sigma_r^2 = 2\sigma_{x,y}^2$ ,  $\mathcal{Q}$  为切片电荷量。

- 仿照思路一, 可构造实验室坐标系  $7 \times 7$  矩阵  $\mathbf{M}_{\text{SC}}^{\text{Lab}}$ 。



**笔记** 思路二适用于当束团长度较长时, 但要求束团为圆柱对称且沿轴对称。



**笔记** 对细节感兴趣的读者, 可参考 C.-Y. Tsai et al., Low-energy high-brightness electron beam dynamics based on slice beam matrix method, Nuclear Instrum. and Methods in Physics Research, A 937 (2019) pp.1-20. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.05.035>

### 14.6.3 整体束团与切片束团的分与合

束团沿  $s$  传输过程, 不同纵向切片有各自的动力学。对于时变电磁部件与束团内空间电荷场, 不同束团切片受到的影响可能不同。因此, 除了描述电磁部件与空间电荷场需要切片传输矩阵, 电子束团自身也需要切片。另外, 几个切片束矩阵描述与束团整体的关系—即“分”与“合”—也需要构建。

由 Vlasov 方程开始, 粒子六维相空间  $f(\mathbf{X}; s)$  分布满足

$$\frac{df}{ds} = \frac{\partial f}{\partial s} + \left( \frac{\partial f}{\partial \mathbf{X}} \right)^T \frac{d\mathbf{X}}{ds} = 0 \quad (14.111)$$

分别定义一阶矩

$$\langle g \rangle = \int g(\mathbf{X}) f(\mathbf{X}) d\mathbf{X} \quad (14.112)$$

与二阶矩

$$\Sigma = \langle (\mathbf{X} - \langle \mathbf{X} \rangle)(\mathbf{X} - \langle \mathbf{X} \rangle)^T \rangle \quad (14.113)$$

则其满足的线性化方程与解分别有

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{X}}{ds} &= \mathbf{A}\mathbf{X} \Rightarrow \langle \mathbf{X}(s_f) \rangle = \mathbf{M}(s_i \rightarrow s_f) \langle \mathbf{X}(s_i) \rangle \\ \frac{d\Sigma}{ds} &= \mathbf{A}\Sigma + \Sigma\mathbf{A}^T \Rightarrow \Sigma(s_f) = \mathbf{M}(s_i \rightarrow s_f) \Sigma(s_i) \mathbf{M}^T(s_i \rightarrow s_f) \end{aligned} \quad (14.114)$$

**分**: 假设束团纵向分布  $g(z)$  与高斯分布差别不大, 即  $g(z) \propto e^{-z^2/2\sigma_z^2}$ , 则第  $i$  切片的粒子数占比约

$$\frac{N_i}{N} \approx \frac{\int_{z_i}^{z_{i+1}} g(z) dz}{\int_{-z_{\max}}^{z_{\max}} g(z) dz} = \frac{1}{2 \operatorname{erf} \left( \frac{z_{\max}}{\sqrt{2}\sigma_z} \right)} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{z_{i+1}}{\sqrt{2}\sigma_z} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{z_i}{\sqrt{2}\sigma_z} \right) \right] \quad (14.115)$$

其中,  $\operatorname{erf}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^x e^{-\chi^2} d\chi$ 。

如果切片束团彼此不是错位得太厉害，束团整体投影发射度可以通过切片束团发射度加权得到，有

$$\epsilon_{x,y}^{\text{proj}} = \mathbb{E} [\epsilon_{x,y}^{\text{slice}}(z)] = \frac{\int \epsilon_{x,y}^{\text{slice}}(z)g(z)dz}{\int g(z)dz} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_z \operatorname{erf}\left(\frac{z_{\max}}{\sqrt{2}\sigma_z}\right)} \int_{-z_{\max}}^{z_{\max}} \epsilon_{x,y}^{\text{slice}}(z)g(z)dz \quad (14.116)$$

其中，

$$\mathbb{E} [\epsilon_{x,y}^{\text{slice}}(z_n)] = \sum_{i=1}^{N_s} \frac{N_i}{N} \epsilon_{x,y}^{\text{slice}}(z_n) \quad (14.117)$$

因此，已知束团整体发射度，则切片发射度有

$$\epsilon_{x,y}^{\text{slice}}(z_n) = \frac{g(\langle z \rangle_i)}{\sum_{j=1}^{N_s} \frac{N_j}{N} g(\langle z \rangle_j)} \epsilon_{x,y}^{\text{proj}} \quad (14.118)$$

注意到，此一小节介绍的是“分”，即给定束团整体，求切片束团的参量。这里介绍的是切片横向发射度的估算，纵向切片束长  $\sigma_{z,i}$ 、切片能散  $\sigma_{z',i}$ 、能量啁啾参量  $\sigma_{zz',i}$  涉及截断高斯分布 (truncated Gaussian distribution) 的分解，分析复杂些，采用 Cholesky 分解。将第  $i$  至  $(i+1)$  切片间的子束团分布写为<sup>31</sup>

$$f(\mathbf{z}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{z}; \langle \mathbf{z} \rangle, \Sigma_{zz'}) \cdot \mathbf{1}_{[z_i, z_{i+1}]}(z) \quad (14.119)$$

对应的切片束矩阵  $\Sigma_{zz'}$  可按如下分解为矩阵  $\Lambda$  与  $\Lambda^T$

$$\Sigma_{zz'} = \Lambda \Lambda^T \quad (14.120)$$

则纵向第  $i$  至  $(i+1)$  切片间的质心期望值与方差分别有

$$\mathbb{E}[\mathbf{z}] = \Lambda \begin{pmatrix} m^* \\ 0 \end{pmatrix} + \langle \mathbf{z} \rangle, \quad \mathbb{V}[\mathbf{z}] = \Lambda \begin{pmatrix} s^* & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Lambda^T \quad (14.121)$$

其中，

$$m^* = -\frac{\phi(\lambda_{i+1}) - \phi(\lambda_i)}{\Phi(\lambda_{i+1}) - \Phi(\lambda_i)}, \quad s^* = 1 - (m^*)^2 - \frac{\lambda_{i+1}\phi(\lambda_{i+1}) - \lambda_i\phi(\lambda_i)}{\Phi(\lambda_{i+1}) - \Phi(\lambda_i)} \quad (14.122)$$

其中， $\lambda_i = (z_i - \langle z \rangle)/\Lambda_{11}$ ,  $\lambda_{i+1} = (z_{i+1} - \langle z \rangle)/\Lambda_{11}$ 。这里的  $\phi$  与  $\Phi$  分别为标准高斯分布的概率密度函数 (probability density functions) 与累积分布函数 (cumulative density functions)。对  $z_i < z < z_{i+1}$  的切片，其切片束的纵向特性参量为

$$\begin{aligned} \langle z \rangle_i &= \Lambda_{11}m^* + \langle z \rangle \\ \langle z' \rangle_i &= \Lambda_{21}m^* + \langle z' \rangle \\ \sigma_{z,i}^2 &= \Lambda_{11}^2 s^* \\ \sigma_{z',i}^2 &= \Lambda_{21}^2 s^* + \Lambda_{22}^2 \\ \sigma_{zz',i} &= \Lambda_{11}\Lambda_{21}s^* \end{aligned} \quad (14.123)$$

<sup>31</sup>这里的  $\mathbf{1}_{[z_i, z_{i+1}]}(z)$  表示当  $z$  在  $[z_i, z_{i+1}]$  间，取值为 1，否则为 0。 $\mathcal{N}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$  为具有平均矩阵  $\boldsymbol{\mu}$  与方差矩阵  $\boldsymbol{\Sigma}$  的多维正态分布 (normal distribution) 或高斯分布 (Gaussian distribution) 的参量。感兴趣的读者，可参考 H. Nurminen et al., Mean and covariance matrix of a multivariate normal distribution with one doubly-truncated component, Technical report from Automatic Control at Linkopings universitet, 2016. <https://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:957625/FULLTEXT02.pdf> 或 N. Johnson, S. Kotz, N. Balakrishnan, Continuous univariate distributions, in: Series in Probability and Statistics, vol. 1, second ed., Wiley (1994) 一书。

一旦给定束团整体的束矩阵后，切片束矩阵与切片束的特性即可得到。

合：整体束团质心有

$$\langle \mathbf{X} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_s} N_i \langle \mathbf{X} \rangle_i \quad (14.124)$$

整体束矩阵有

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma} &= \langle (\mathbf{X} - \langle \mathbf{X} \rangle)(\mathbf{X} - \langle \mathbf{X} \rangle)^T \rangle \\ &= \langle \mathbf{X} \mathbf{X}^T \rangle - \langle \mathbf{X} \langle \mathbf{X}^T \rangle \rangle - \langle \langle \mathbf{X} \rangle \mathbf{X}^T \rangle + \langle \langle \mathbf{X} \rangle \langle \mathbf{X}^T \rangle \rangle \\ &= \langle \mathbf{X} \mathbf{X}^T \rangle - \langle \mathbf{X} \rangle \langle \mathbf{X}^T \rangle \end{aligned} \quad (14.125)$$

第  $i$  切片束矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}_i = \langle \mathbf{X} \mathbf{X}^T \rangle_i - \langle \mathbf{X} \rangle_i \langle \mathbf{X}^T \rangle_i \quad (14.126)$$

整体束矩阵  $\boldsymbol{\Sigma}$  与切片束矩阵  $\boldsymbol{\Sigma}_i$  可以互相关联，有

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_s} N_i \langle \mathbf{X} \mathbf{X}^T \rangle_i - \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_s} N_i \langle \mathbf{X} \rangle_i \right] \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_s} N_i \langle \mathbf{X}^T \rangle_i \right] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_s} N_i [\boldsymbol{\Sigma}_i + \langle \mathbf{X} \rangle_i \langle \mathbf{X}^T \rangle_i] - \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_s} N_i \langle \mathbf{X} \rangle_i \right] \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N_s} N_i \langle \mathbf{X}^T \rangle_i \right] \end{aligned} \quad (14.127)$$

其中， $N_s$  为切片数，投影发射度有  $\epsilon_x^{\text{proj}} = \sqrt{\det \boldsymbol{\Sigma}_{xx'}}$ 。其余整体束团的特性参数均可由此矩阵得到。

## 14.7 空间电荷束包络方程

上面提到，可以通过切片束矩阵推导包络方程，此处证明两者等价。先考虑包含加速过程的横向一维单粒子方程，可写出<sup>32</sup>

$$\mathcal{A}_{xx'} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -K_x & -\frac{\gamma'}{\beta^2\gamma} \end{pmatrix} \quad (14.128)$$

代入包络方程  $\frac{d\boldsymbol{\Sigma}}{ds} = \mathbf{A}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}\mathbf{A}^T$ ，有

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \frac{d\sigma_x^2}{ds} & \frac{d\sigma_{xx'}}{ds} \\ \frac{d\sigma_{xx'}}{ds} & \frac{d\sigma_{x'}^2}{ds} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2\sigma_{xx'} & \sigma_{x'}^2 - K_x\sigma_x^2 + \mathbb{K}_{SC,x}\sigma_x^2 - \frac{\gamma'}{\beta^2\gamma}\sigma_{xx'} \\ \sigma_{x'}^2 - K_x\sigma_x^2 + \mathbb{K}_{SC,x}\sigma_x^2 - \frac{\gamma'}{\beta^2\gamma}\sigma_{xx'} & -2K_x\sigma_{xx'} + 2\mathbb{K}_{SC,x}\sigma_{x,x'} - 2\frac{\gamma'}{\beta^2\gamma}\sigma_{x'}^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (14.129)$$

以上几个一阶微分方程可以合写为如下二阶微分方程

$$\sigma''_x + \frac{\gamma'(s)}{\beta^2\gamma(s)}\sigma'_x + K_x\sigma_x = \frac{\sigma_{x'}^2}{\sigma_x} - \frac{(\sigma'_x)^2}{\sigma_x} + \mathbb{K}_{SC,x}\sigma_x = \frac{\epsilon_x^2}{\sigma_x^3} + \mathbb{K}_{SC,x}\sigma_x \quad (14.130)$$

其中， $\mathbb{K}_{SC,x}\sigma_x = (\mathcal{K}_{SC}/\sigma_x) R_D$ 。此即横向空间电荷包络方程，为教科书中的结果。

接着，考虑一般教科书较少讨论的纵向包络方程。考虑加速过程的纵向一维单粒子方程，可写出

$$\begin{aligned} \frac{dz}{ds} &= A_{55}z + A_{56}z' \\ \frac{dz'}{ds} &= A_{65}z + A_{66}z' + \mathbb{K}_{SC,z}z \end{aligned} \quad (14.131)$$

将对应的  $\mathcal{A}_{zz'}$  代入包络方程，有

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} \frac{d\sigma_z^2}{ds} & \frac{d\sigma_{zz'}}{ds} \\ \frac{d\sigma_{zz'}}{ds} & \frac{d\sigma_{z'}^2}{ds} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2(A_{55}\sigma_z^2 + A_{56}\sigma_{zz'}) & A_{65}\sigma_z^2 + (A_{55} + A_{66})\sigma_{zz'} + A_{56}\sigma_{z'}^2 + \mathbb{K}_{SC,z}\sigma_z^2 \\ \text{同右上} & 2A_{66}\sigma_{z'}^2 + 2(A_{65} + \mathbb{K}_{SC,z})\sigma_{zz'} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (14.132)$$

将以上三个方程写为一个，有

$$\sigma''_z + \text{Tr}(\mathcal{A})\sigma'_z + \det(\mathcal{A})\sigma_z = A_{56}^2 \frac{\epsilon_z^2}{\sigma_z^3} + A_{56}\mathbb{K}_{SC,z}\sigma_z \quad (14.133)$$

其中，

$$\text{Tr}(\mathcal{A}) = A_{55} + A_{66}, \quad \det(\mathcal{A}) = A_{55}A_{66} - A_{56}A_{65} \quad (14.134)$$

化简过程还用了  $\epsilon_z^2 = \sigma_z^2\sigma_{z'}^2 - \sigma_{zz'}^2$ 。当  $A_{55}, A_{66}$  很小，且  $A_{56} \approx 1$  时，上面纵向包络方程

<sup>32</sup>此矩阵是由拆解 Hill 方程

$$x'' + \frac{\gamma'(s)}{\beta^2\gamma(s)}x' + K_x(s)x = 0$$

为两个一阶方程后得到。

退化为

$$\sigma_z'' + \kappa_{z,\text{RF}}^2 \sigma_z = \frac{\epsilon_z^2}{\sigma_z^3} + \mathbb{K}_{\text{SC},z} \sigma_z \quad (14.135)$$

其中,  $\kappa_{z,\text{RF}}^2$  表征外部电场导致的等效聚焦/散焦效应。此式为教科书中的结果。

**注** 由上可知, 利用束矩阵容易给出推广的、更具一般性的包络方程。包络方程本身是非线性方程, 但是束矩阵方程则是线性方程。

### 定理 14.7. 空间电荷包络方程 (space charge envelope equation)

由包含粒子加速过程的 Hill 方程, 结合束团空间电荷作用造成的等效散焦效应, 可以得到横向空间电荷包络方程

$$\sigma_x'' + \frac{\gamma'(s)}{\beta^2 \gamma(s)} \sigma_x' + K_x \sigma_x = \frac{\epsilon_x^2}{\sigma_x^3} + \mathbb{K}_{\text{SC},x} \sigma_x \quad (14.136)$$

其中,

- 等式左边  $\gamma'$  为粒子加速过程绝热 (adiabatic) 效应
- $K_x$  为外部四极场的聚焦/散焦效应
- $\epsilon_x$  为束团几何发射度
- $\mathbb{K}_{\text{SC},x} = \sqrt{f_{\text{SC},x}^{-1}}$  为空间电荷作用造成的等效散焦
- 空间电荷导流系数  $\mathbb{K}_{\text{SC},x} \sigma_x = \left( \frac{\mathcal{K}_{\text{SC}}}{\sigma_x} \right) R_D$
- $\mathcal{K}_{\text{SC}} = \frac{Ne^2}{2\pi\epsilon_0\beta^2\gamma^3 mc^2} = \frac{2I}{\beta^3 \gamma^3 I_A}$  称 space charge perveance
- $R_D \left( \frac{a}{c}, \frac{b}{c}, 1 \right) = c^{3/2} \mathcal{R}_D(a, b, c)$
- $\mathcal{R}_D(x, y, z) = \frac{3}{2} \int_0^\infty \frac{dt}{(t+x)^{1/2}(t+y)^{1/2}(t+z)^{3/2}}$  为 Carlson's elliptic integral of the second kind

类似地, 有纵向空间电荷包络方程

$$\sigma_z'' + \kappa_{z,\text{RF}}^2 \sigma_z = \frac{\epsilon_z^2}{\sigma_z^3} + \mathbb{K}_{\text{SC},z} \sigma_z \quad (14.137)$$

其中,  $\kappa_{z,\text{RF}}^2$  表示由于外部电场导致的等效聚焦/散焦效应,  $\mathbb{K}_{\text{SC},z} = \sqrt{f_{\text{SC},z}^{-1}}$ 。

**证明** 证明可以通过单粒子分析, 参考 M. Reiser, Theory and Design of Charged Particle Beams, Wiley-VCH。或者通过束矩阵法, 参考 C.-Y. Tsai et al., Low-energy high-brightness electron beam dynamics based on slice beam matrix method, Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A 937 (2019) 1-20. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.05.035>

### 定义 14.9. 空间电荷主宰的束团 vs. 发射度主宰的束团

基于以上空间电荷包络方程, 根据束动力学的不同表现, 可以区分为

- 空间电荷主宰 (space charge dominated)  $\Leftrightarrow \frac{\epsilon_x^2}{\sigma_x^3} \ll \mathbb{K}_{\text{SC},x} \sigma_x$
- 发射度主宰 (emittance dominated)  $\Leftrightarrow \frac{\epsilon_x^2}{\sigma_x^3} \gg \mathbb{K}_{\text{SC},x} \sigma_x$

**注** 两种不同情况主宰的束动力学，其特性不太一样，细节此处不论。对细节感兴趣的读者，可参考 Martin Reiser, Theory and Design of Charged Particle Beams, Second, Updated and Expanded Edition, Wiley-VCH (2008)。

**注** 空间电荷主宰还可进一步细分横向空间电荷主宰与纵向空间电荷主宰。不难想象，对雪茄状束团 (pancake beam)，即  $\sigma_z \gg \sigma_{x,y}$ ，横向空间电荷效应会比纵向来的明显；对松饼状束团 (cigar beam)，即  $\sigma_z \ll \sigma_{x,y}$ ，纵向空间电荷效应会比横向来的明显。当把束团自场的空间电荷效应列入分析后，束团形状在传输过程中将不再固定，而可能随着  $s$  演化。在一些文献中，当束团处于纵向空间电荷效应主导时，又称该束团处于 blowout 区间或 blowout 模式 (blowout regime)。

**注** 一般来说，考虑空间电荷情况下，松饼状束团随  $s$  演化后具有高电荷量和低能散特性，雪茄状束团演化后则具有低发射度和高可压缩特性。 □

**注** 近期 M.D. Kelisani 等人工作开展六维包络方程的半解析模型，拟用于 AWAKE 线上/即时调试、设计优化。模型似虽不涉及切片跟踪，但是与 ASTRA 对比结果出奇一致，空间电荷场的计算采用“查表法”，其成立原因可能为考虑的束长 ( $\sigma_z \approx 0.06 \sim 0.18 \mu\text{m}$ ) 较短。细节可参考 M.D. Kelisani et al., Six-Dimensional Beam-Envelope Equations: An Ultrafast Computational Approach for Interactive Modeling of Accelerator Structures, Phys. Rev. Applied **19**, 054011 (2023). <https://journals.aps.org/prapplied/pdf/10.1103/PhysRevApplied.19.054011>

## 14.8 Kapchinsky-Vladimirsky (KV) 分布

§11.2介绍空间电荷场的时候，由单个带电粒子在空间的库仑场开始

$$\begin{aligned} E_x &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q\gamma x}{[x^2 + y^2 + \gamma^2(s - vt)^2]^{3/2}} \\ E_y &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q\gamma y}{[x^2 + y^2 + \gamma^2(s - vt)^2]^{3/2}} \\ E_z &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q\gamma z}{[x^2 + y^2 + \gamma^2(s - vt)^2]^{3/2}} \end{aligned} \quad (14.138)$$

在圆柱对称情况下，可写成

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \mathbf{E}(\rho, z) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2q\rho}{\rho^2} \lambda(z) \quad (14.139)$$

其中， $\rho = (x, y)$ ,  $\rho^2 = x^2 + y^2$ 。通过叠加原理，在线束团近似 (line bunch approximation) 情况下，束团内任一位置的横向、纵向电场有

$$\begin{aligned} E_\rho(z, \rho) &= \int dE_\rho(z, z', \rho) = \frac{Q\rho}{4\pi\epsilon_0\gamma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\lambda(z') dz'}{\left[(z - z')^2 + \frac{\rho^2}{\gamma^2}\right]^{3/2}} \\ E_z(z) &= \int dE_z(z, z') = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0\gamma^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \lambda(z') \frac{z - z'}{|z - z'|^3} \end{aligned} \quad (14.140)$$

其中， $Q$  为束团整体的电荷 (带号)。

可以看到，在束团内不同位置处，场的大小与坐标位置的依存关系为非线性关系，体现下图 14.31 空间电荷场的样貌。这种“非线性”行为给通过解析方法研究束团的动力学过程带来挑战。因此，有时候分析时会假设仅考虑束团局部的动力学过程，采用线性近似。但是，如果仅是采用局部线性近似，可能在某些时候其它非线性项的贡献会在非预期情况下跑来“搅局”能不能构造出一种束团分布，使束团内任一位置的空间电荷场为线性场。这里线性场的意思是，束团内任一位置的空间电荷场大小与该位置坐标成正比。这种束团分布函数存在吗？ $\Rightarrow$  存在，称为 Kapchinsky-Vladimirsky 分布 (Kapchinsky-Vladimirsky distribution, KV distribution)。

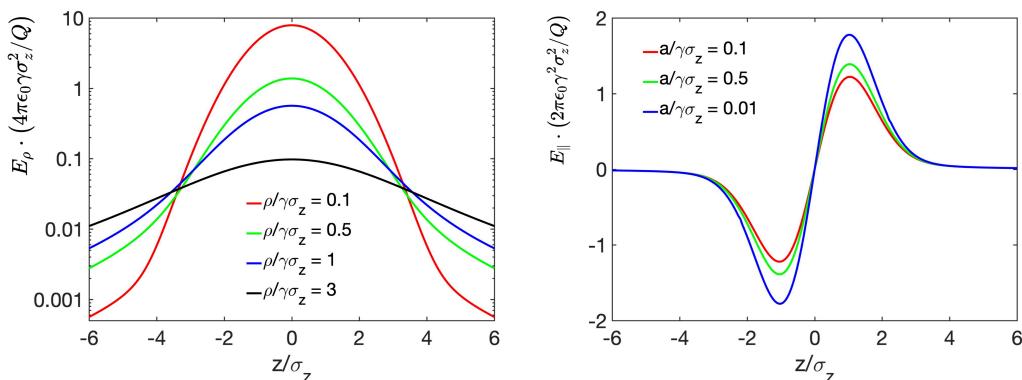


图 14.31：纵向高斯分布束团的横向与纵向空间电荷场。

### 定义 14.10. Kapchinsky-Vladimirsky (KV) 分布

由 I.M. Kapchinsky<sup>a</sup>与 V.V. Vladimirsky 在 1959 年提出。KV 分布有多种表示形式，均表征相空间分布函数在四维相空间中仅在边缘处有值，为“四维空心壳”，且为硬壳 (hard sphere)。不同文献援引的形式有些不同，此举部分形式如下：

- 当写成相空间  $(x, x', y, y')$  或束团几何发射度形式时，KV 分布函数有

$$\Psi_{\text{KV}}(x, x', y, y') = \Psi_{\text{KV}}(\varepsilon_x, \varepsilon_y) = \frac{1}{\pi^2 \epsilon_x \epsilon_y} \delta \left( 1 - \frac{\varepsilon_x}{\epsilon_x} - \frac{\varepsilon_y}{\epsilon_y} \right) \quad (14.141)$$

其中， $\delta(\dots)$  为 (四维)Dirac delta 函数。这里的  $\epsilon_x, \epsilon_y$  为束团在边缘处的发射度 (边缘处绕出的椭圆面积/ $\pi$ )， $\varepsilon_x(x, x'), \varepsilon_y(y, y')$  为不同  $(x, x'), (y, y')$  绕出的对应的发射度 (或绕出的椭圆面积/ $\pi$ )

$$\begin{aligned} \varepsilon_x(x, x') &= \gamma_x x^2 + 2\alpha_x x x' + \beta_x x'^2 \\ \varepsilon_y(y, y') &= \gamma_y y^2 + 2\alpha_y y y' + \beta_y y'^2 \end{aligned} \quad (14.142)$$

归一化条件有

$$\int_0^{\epsilon_x} d\varepsilon_x \int_0^{\epsilon_y} d\varepsilon_y \Psi_{\text{KV}}(\varepsilon_x, \varepsilon_y) = 1 \quad (14.143)$$

或

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \Psi_{\text{KV}}(x, x', y, y') = 1 \quad (14.144)$$

- 当写成相空间  $(x, p_x, y, p_y)$  形式时，KV 分布函数也可写成

$$\Psi_{\text{KV}}(x, p_x, y, p_y) = \frac{Q\lambda(z)}{\pi^2 \epsilon_x \epsilon_y} \delta \left( 1 - \frac{x^2}{a^2} - \frac{a^2 p_x^2}{\epsilon_x^2} - \frac{y^2}{b^2} - \frac{b^2 p_y^2}{\epsilon_y^2} \right) \quad (14.145)$$

其中， $\delta(\dots)$  为 (四维)Dirac delta 函数。归一化条件有<sup>b</sup>

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \Psi_{\text{KV}}(x, p_x, y, p_y) = Q\lambda(z) \quad (14.146)$$

- 从  $(x, p_x, y, p_y)$  经过正则变换到  $(\phi_x, I_x, \phi_y, I_y)$ ，其中， $\phi_{x,y}$  与  $I_{x,y}$  分别为横向四维相空间的角度-作用量正则坐标，则 KV 分布函数有

$$\Psi_{\text{KV}}(\phi_x, \phi_y, I_x, I_y) = \frac{n_0}{4\pi^2 I_{x0} I_{y0}} \delta \left( 1 - \frac{I_x}{I_{x0}} - \frac{I_y}{I_{y0}} \right) \quad (14.147)$$

根据以上分布函数，归一化条件有<sup>c</sup>

$$\int_0^{2\pi} d\phi_x \int_0^{2\pi} d\phi_y \int_0^{I_{x0}} dI_x \int_0^{I_{y0}} dI_y \Psi_{\text{KV}}(\phi_x, \phi_y, I_x, I_y) = n_0 \quad (14.148)$$

其中， $n_0$  为线密度 ( $z$ ) 分布，单粒子发射度 (single-particle emittance) 或作用量  $I_{x,y}$  为

$$\begin{aligned} 2I_x &= \gamma_x x^2 + 2\alpha_x x x' + \beta_x x'^2 \\ 2I_y &= \gamma_y y^2 + 2\alpha_y y y' + \beta_y y'^2 \end{aligned} \quad (14.149)$$

这里的  $I_{x0}, I_{y0}$  为常数。

<sup>a</sup> 原始论文可参考 I.M. Kapchinsky and V.V. Vladimirsky, Limitations of proton beam current in a strong focusing linear accelerator associated with the beam space charge, in Proceedings of the International Conference on High Energy Accelerators (Geneva,

Switzerland), pp. 274-288 (1959). <https://inspirehep.net/literature/919865>。

<sup>a</sup>I.M. Kapchinsky 与 V.A. Teplyakov 同为发明质子射频四极直线加速器 (radio-frequency quadrupole, RFQ) 的人。此处 RFQ 也写成 RFQ linac, 不应与射频四极铁 (radio-frequency quadrupole magnet, RFQM) 搞混。

<sup>b</sup>此处的  $Q\lambda$  也可写成  $n_0$ , 或者也可以写成 1 即可, 只要分析前后保持一致就行。

<sup>c</sup>留意, Dirac delta 函数有伸缩特性:  $\delta(at) = \frac{\delta(t)}{|a|}$  ( $a \neq 0$ )。 □

### 性质 14.1. KV 分布的特性

KV 分布的特性有:

1. 在二维相空间  $(x, x')$  或  $(y, y')$  为均匀椭圆分布。
2. 束团内任一位置的电场为线性场。

以上结果简短说明如下:

**证明** 关于 1, 由 Dirac delta 函数与 Heaviside 步阶函数的特性

$$\delta(x) = \frac{d}{dx} H(x), \quad H(x) = \int_{-\infty}^x \delta(s) ds \quad (14.150)$$

知, 以上 KV 分布为四维相空间函数, 当投影在二维实空间  $(x, y)$  时, 为 均匀椭圆 分布, 即

$$\begin{aligned} \psi_{\text{KV}}(x, y) &= \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \Psi_{\text{KV}}(x, p_x, y, p_y) \\ &= \frac{Q\lambda(z)}{\pi ab} H\left(1 - \frac{x^2}{a^2} - \frac{y^2}{b^2}\right) \end{aligned} \quad (14.151)$$

其中,  $a, b$  为束团在  $x, y$  方向的尺寸。这里的  $H$  为 Heaviside 步阶函数。

**证明** 关于 2, 有叠加原理, 有

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\perp}(x, y) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2q\rho}{\rho^2} \lambda(z) \\ &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Q\lambda(z)}{\pi ab} \iint_{(x'/a)^2 + (y'/b)^2 < 1} \frac{(x - x')\mathbf{e}_x + (y - y')\mathbf{e}_y}{(x - x')^2 + (y - y')^2} dx' dy' \end{aligned} \quad (14.152)$$

其中,  $\rho = (x - x', y - y')$ ,  $\rho^2 = (x - x')^2 + (y - y')^2$ 。经过稍微繁杂的计算, 可得

$$\mathbf{E}_{\perp}(x, y) = \frac{4Q\lambda}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{x}{a(a+b)} \mathbf{e}_x + \frac{y}{b(a+b)} \mathbf{e}_y \right] \quad (14.153)$$

可以看到,  $E_x \propto x, E_y \propto y$ , 如预期。磁场可以根据  $\mathbf{B} = \frac{1}{c} \hat{\mathbf{z}} \times \mathbf{E}$  得到, 有

$$B_x(x, y) = -\frac{\beta_0}{c} E_y, \quad B_y(x, y) = +\frac{\beta_0}{c} E_x \quad (14.154)$$

**注** 对以上稍微繁杂的计算感兴趣的读者, 可参考 Andrzej Wolski, Beam Dynamics in High Energy Particle Accelerators, Imperial College Press (2014) 一书的 §12.1。 □

对 KV 分布函数感兴趣的读者可能会好奇, KV 分布有较简单的空间电荷场, 那么对 KV 分布来说, 它的包络方程为何? 形式也比上一节末尾给出的定理简单些。此处略去证

明，仅给出结果。

### 定理 14.8. KV 分布满足的空间电荷包络方程

对纵向均匀分布、电流  $I_b$ 、横向为 KV 分布的束团，包含外部  $x$  方向聚焦与空间电荷作用的束团横向包络方程有

$$\begin{aligned}\sigma_x'' + \frac{\gamma'(s)}{\beta^2\gamma(s)}\sigma'_x + K_x\sigma_x &= \frac{\epsilon_x^2}{\sigma_x^3} + \frac{\mathcal{K}_{SC}}{2(\sigma_x + \sigma_y)} \\ \sigma_y'' + \frac{\gamma'(s)}{\beta^2\gamma(s)}\sigma'_y - K_x\sigma_y &= \frac{\epsilon_y^2}{\sigma_y^3} + \frac{\mathcal{K}_{SC}}{2(\sigma_x + \sigma_y)}\end{aligned}\quad (14.155)$$

其中， $\mathcal{K}_{SC}$  为空间电荷导流系数，无量纲

$$\mathcal{K}_{SC} = \frac{2I_b}{\beta^3\gamma^3 I_A} \quad (14.156)$$

其中， $I_b = q\lambda\beta c$  为束团电流， $I_A \approx 17045$  A 为 Alfvén 电流。此为耦合二阶微分方程。

**证明** 参考 Andrzej Wolski, Beam Dynamics in High Energy Particle Accelerators, Imperial College Press (2014) 一书的 §12.2。

**注** 如前所述，基于以上空间电荷包络方程，根据束动力学的不同表现，当  $\mathcal{K}_{SC}$  项远大于  $\epsilon_{x,y}$  项时，称束团在空间电荷主宰区间；当  $\epsilon_{x,y}$  项远大于  $\mathcal{K}_{SC}$  项时，则称束团在发射度主宰区间。

- 空间电荷主宰 (space charge dominated)  $\Leftrightarrow \frac{\epsilon_{x,y}^2}{\sigma_{x,y}^3} \ll \frac{\mathcal{K}_{SC}}{2(\sigma_x + \sigma_y)}$
- 发射度主宰 (emittance dominated)  $\Leftrightarrow \frac{\epsilon_{x,y}^2}{\sigma_{x,y}^3} \gg \frac{\mathcal{K}_{SC}}{2(\sigma_x + \sigma_y)}$

**注** 留意，这里  $\mathcal{K}_{SC}$  与前面的  $\mathbb{K}_{SC} = \frac{\mathcal{K}_{SC}}{\sigma^2} R_D$  的量纲不太一样。 □

### 性质 14.2. KV 分布的特性

基于以上定理，考虑未聚束、纵向均匀分布的束团，在平衡时 ( $\sigma_{x,y}'' = 0$ )，且仅考虑线性传输 (即忽略加速过程  $\gamma' = 0$ )，其发射度  $\epsilon_{x,y}$  将守恒，尽管存在空间电荷效应。

基于此结果，可进一步推论得到传输过程平衡时的束团尺寸。

**证明** 作为练习，自行推导。 □

**练习 14.8** 考虑一圆对称束团 (round beam) 在横向均匀聚焦的螺线管中，令横向平均尺寸  $\sigma = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2}$ ，则包络方程可写成

$$\sigma'' + K_{sol}\sigma = \frac{\mathcal{K}_{SC}}{\sigma} + \frac{\epsilon_{th}^2}{\sigma^3}$$

其中， $\epsilon_{th}$  为几何热发射度。求解束团在传输过程平衡时的束团尺寸。 ■

**解**

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{2} \left( \sigma_{SC}^2 + \sqrt{\sigma_{SC}^4 + 4\sigma_{th}^4} \right)}$$

其中，

$$\sigma_{\text{SC}} = \sqrt{\frac{K_{\text{SC}}}{K_{\text{sol}}}}, \quad \sigma_{\text{th}} = \sqrt{\frac{\epsilon_{\text{th}}}{\sqrt{K_{\text{sol}}}}}$$

■

**练习 14.9** 对求解空间电荷包络方程感兴趣的读者，可利用 MATLAB，试着自己写一段代码求解。 ■

由上面介绍知道，KV 分布可视为在四维相空间“边缘”取值的函数，当投影在二维实空间  $(x, y)$  时，为均匀分布。在一些分析集体效应的教科书或文献中，还有一个常见的相空间分布函数，称水袋分布 (water-bag distribution)。定义如下：

### 定义 14.11. 水袋分布

参考图 14.32，其分布函数为在二维相空间为均匀椭圆，定义为

$$\Psi_0(r) = \begin{cases} 0 & \text{if } r > \hat{z} \\ \frac{1}{\pi \hat{z} \delta} & \text{if } r < \hat{z} \end{cases} \quad (14.157)$$

其中，

$$\left(\frac{r}{\hat{z}}\right)^2 = \left(\frac{z}{\hat{z}}\right)^2 + \left(\frac{\delta}{\hat{\delta}}\right)^2 \quad (14.158)$$

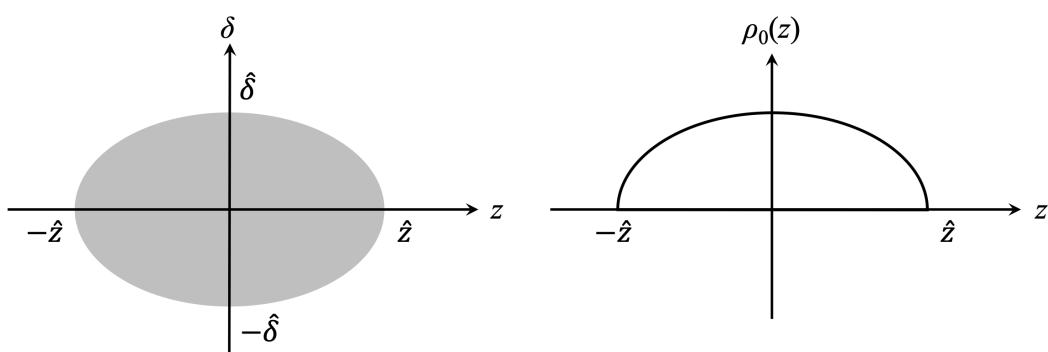
当投影在一维实空间 (比如： $z$ ) 时，为双曲线 (hyperbolic) 分布，有

$$\rho_0(z) = \int_{-\hat{z}}^{\hat{z}} \Psi_0(r) d\delta = \frac{2}{\pi \hat{z}^2} \sqrt{\hat{z}^2 - z^2} \quad (14.159)$$

且

$$\int_{-\hat{z}}^{\hat{z}} \rho_0(z) dz = 1 \quad (14.160)$$

□



$$\Psi_0(r) = \begin{cases} 0 & \text{if } r > \hat{z} \\ \frac{1}{\pi \hat{z} \delta} & \text{if } r < \hat{z} \end{cases} \quad \rho_0(z) = \int_{-\hat{z}}^{\hat{z}} \Psi_0(r) d\delta = \frac{2}{\pi \hat{z}^2} \sqrt{\hat{z}^2 - z^2}$$

图 14.32：水袋分布。左图为水袋分布的相空间样貌；右图为线密度分布函数。图例修改自 A.W. Chao 一书。

练习 14.10 §13.1 定义过群聚因子，试估算水袋分布的群聚因子。 ■

解 根据群聚因子的定义，有

$$b(\lambda = 2\hat{z}) = \int_{-\hat{z}}^{\hat{z}} \rho(z) e^{-i(\frac{2\pi}{\lambda})z} dz = \frac{\lambda}{\pi \hat{z}} J_1 \left( 2\pi \frac{\hat{z}}{\lambda} \right) \approx \frac{2}{\pi} (0.2846) \approx 0.18$$

在相空间均匀分布的函数，由于密度分布不均匀，其群聚因子不为零。 ■

## 14.9 空间电荷效应主宰的束动力学与几个定标定律

上一节介绍了研究空间电荷效应动力学的一个特殊分布函数—KV分布—之后，这一节总结低能量、空间电荷效应主宰的束动力学的标准量化参数与几个定标定律。

“高亮度”通常表征较大的束团电荷量与较小的束团相空间体积，意味着低发射度、高峰值电流与较小的能散。换句话说，束团里每个粒子的行为都很像，也就意味着容易产生集体效应。对低能量、高亮度束团，从粒子最初产生开始与传输过程，无不受到空间电荷自场影响。除了用 §7.5 介绍的束团发射度  $\epsilon_{x,y}$  用以量化束团在传输过程的品质如何变化，上一节也介绍了包络方程用来描述束团在传输过程，其尺寸  $\sigma_{x,y}(s)$  如何随时间变化的动力学。在介绍包络方程时，我们定义了两个区间：空间电荷主宰区间 (space charge dominated) 与发射度主宰 (emittance dominated) 区间。此两区间可以层流参数 (laminar parameter)  $\rho$  量化定义如下：

### 定义 14.12. 层流参数 (laminar parameter) $\rho$

定义为

$$\rho = \frac{I}{2I_A\gamma} \frac{\sigma^2}{\epsilon_N^2} \quad (14.161)$$

其中， $I$  为峰值电流， $I_A = 17045$  A 为 Alfvén 电流， $\sigma$  为横向束团 (平均) 尺寸， $\epsilon_N$  为归一化束团发射度。

当  $\rho > 1$  时，称空间电荷主宰区间；当  $\rho < 1$  时，称发射度主宰区间，又称热区间 (thermal regime)。不同主宰区间，束团的动力学特性不同。束团可能在传输过程中一个区间过渡到另一个区间，其渡越能量 (transition energy) 有

$$\gamma_t = \frac{I}{2I_A} \frac{\sigma^2}{\epsilon_N^2} \quad (14.162)$$

**注** 不要把这里的层流参数  $\rho$  与 Pierce 参数或 FEL 参数混淆。不要把这里的渡越能量  $\gamma_t$  与储存环的渡越能量混淆。

**练习 14.11** 对峰值电流 100 A、归一化发射度  $1 \mu\text{m}$ 、横向尺寸  $300 \mu\text{m}$  的束团，估算其渡越能量。

**解**  $\gamma_t$  约 131 MeV。低于此能量，表示束团动力学为空间电荷主宰；高于此能量，表示束团动力学为发射度主宰。



**笔记** 由于在两种区间动力学差异，对直线加速器驱动的短波长 FEL 装置，在这两个不同能量区间的传输段设计与分析方式不太一样。当束团在下游经历束团压缩时，可能由于峰值电流飙高，将从发射度主宰区间过渡到空间电荷主宰区间，在那时候将需要评估空间电荷效应。

顾名思义，“层流”为束团在传输过程中，束团内不同粒子间，彼此的实空间轨迹不相交叉(不相碰撞)。此图像与第11章(§11.1)介绍的平均场近似、集体效应的物理图像一致。

### 定义 14.13. 布里渊 (Brillouin) 流

又称层流 (laminar flow)，束团内不同粒子间，彼此的实空间轨迹不相交叉(不相碰撞)，参考图 14.33，同时比较与非层流 (non-laminar flow) 的差异。

图 14.33 上图显示的束流为在一开始完全沿对称轴  $z$  传播；在这种特殊情况下，所有粒子的横向速度都为零，且无实空间相交的轨迹。忽略束团内粒子间碰撞和内部场，如库仑场，一平行层状束流可以在横向尺寸不变的情况下传播到无限远。当束流穿过完美的、线性的聚焦透镜时，束团将转化为一收敛/聚焦的层流束。由于线性透镜后的横向速度与轴向偏移成正比，不同粒子的轨迹定义了一系列相似的三角形，收敛到下游单一点。继续穿过焦点后，粒子遵循发散/散焦的轨迹。对此一理想情况，总是可以通过适当焦距的透镜将发散或收敛的束流转化为平行层状束流。□

相对于层流束，参考图 14.33 下图，对非层流束中的粒子，在同一位置具有非零横向速度(大小、方向)的随机分布。由于非层流束的无序性，不可能将束团中的所有粒子聚焦到一个共同的焦点。换句话说，透镜只能影响粒子的大致、平均运动。非层流束的相空间图不再是一条直线，束团占据相空间形成有限大小的相空间面积，以发射度表征。

**注** 严格来说，加速器中的粒子束不是理想的层流束，而更像是非层流束。但为了简化分析，有时候会从层流束开始。束动力学一般考虑非层流束，同时做一些接近层流束的假设，比如傍轴近似  $p_{\perp} \ll p_z \approx p$ 、 $x' = p_x/p_s \approx p_x/p$  或  $y' = p_y/p_s \approx p_y/p$  等。

前面 §14.4.3 介绍过射频/RF 光阴极电子枪附近的发射度增长的估算。一般来说，为了得到在传输段出口处最小的束团投影发射度，需要进行“发射度补偿”(emittance compensation)，即通过数值方法优化一组特定参数，需要扫描多个相关物理量。由于考虑了空间电荷效应，此优化过程可能非常耗时。因此，一个直观/合理的问题是：是否能在给定一组已经优化后的参数为前提下，通过几个定标定律，能够很快得到对不同束团电荷量、不同射频/RF 腔波长情况下，相关物理量仍能达到最优解？可以。以下总结空间电荷效应主宰的束动力学的几个定标定律：

### 定律 14.3. 空间电荷效应主宰的束动力学的几个定标定律

在给定一组已优化后的参数，包含加速腔参数与束团参数，在考虑空间电荷效应

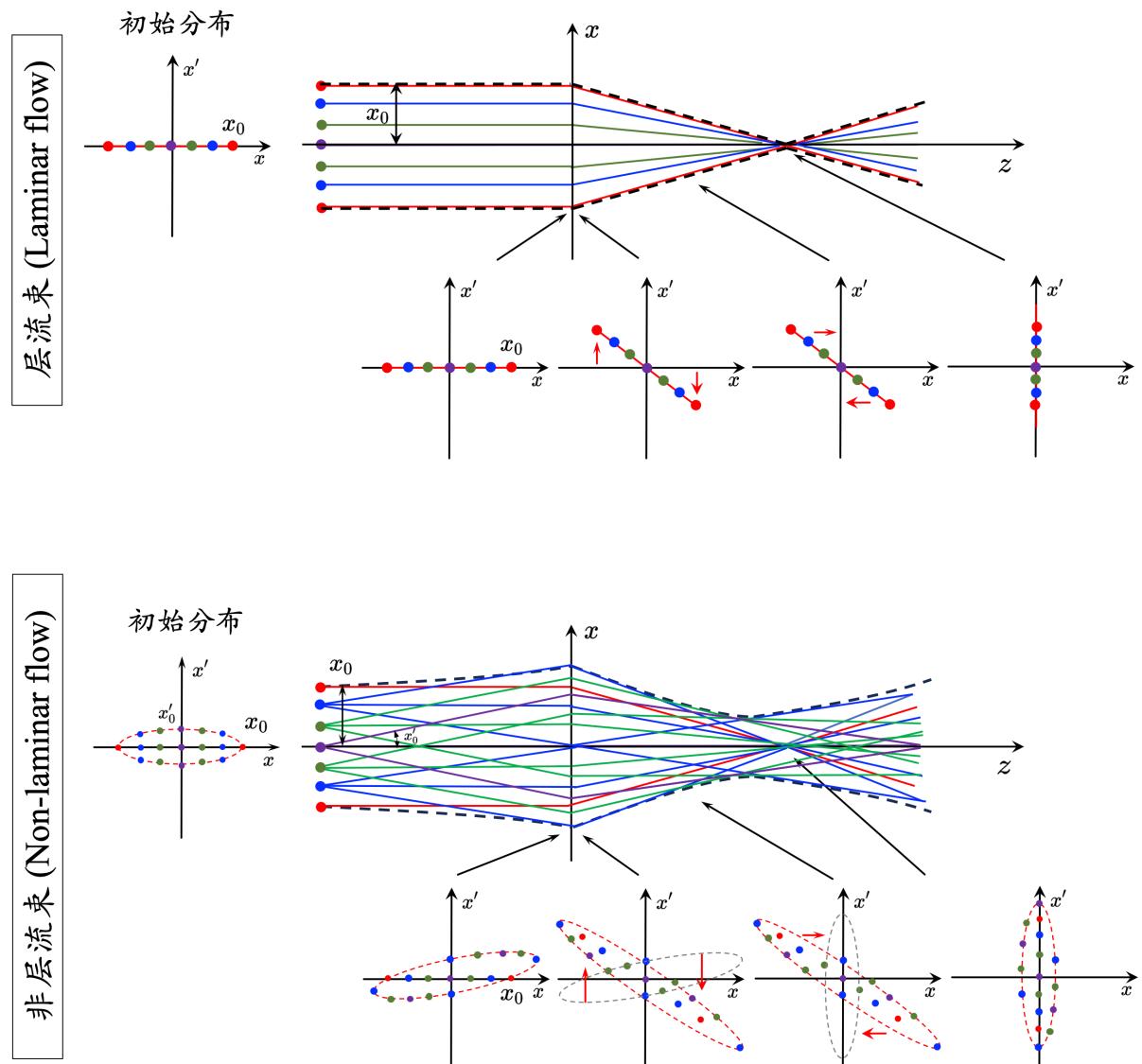


图 14.33: 层流束与非层流束的横向实空间与横向相空间样貌。上图为层流束, 下图为非层流束。图例修改自 M. Ferrario, Introduction to High Brightness Electron Beam Dynamics. [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-25850-4\\_6](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-25850-4_6)。

情况下，当调整束团电荷或射频/RF 腔波长时，相关物理量将满足如下定标定律：

物理量	束团电荷量	射频/RF 腔波长
束团电荷量 $Q$		$\propto \lambda$
束团横纵尺寸 $\sigma_{xf}, \sigma_{yf}, \sigma_{zf}$	$\propto Q^{1/3}$	$\propto \lambda$
峰值电场 $E_{pk}$		$\propto \lambda^{-1}$
峰值磁场 $B_{pk}$		$\propto \lambda^{-1}$
$\epsilon_{sc}$	$\propto Q^{2/3}$	$\propto \lambda$
$\epsilon_{th}$	$\propto Q^{1/3}$	$\propto \lambda$
$\epsilon_{RF}$	$\propto Q^{4/3}$	$\propto \lambda$

**注** 原始论文可参考 J. Rosenzweig and E. Colby, Charge and Wavelength Scaling of RF Photoinjectors: A Design Tool, AIP Conf. Proc. 335, 724-737 (1995). <https://accelconf.web.cern.ch/p95/ARTICLES/WPB/WPB05.PDF>。

**笔记** 一个实用公式：根据以上分析，对 1.6-cell S-band 光阴极电子枪注入器，在出口处的横向归一化发射度与束长随束团电荷量的拟合关系可写成

$$\begin{aligned}\epsilon_{Nx,Ny} &= \beta\gamma\epsilon_{x,y} \approx (1.45 \text{ } \mu\text{m}) \cdot \sqrt{0.38 \cdot Q^{4/3}[\text{nC}] + 0.095 \cdot Q^{8/3}[\text{nC}]} \\ \sigma_z &\approx (0.63 \text{ mm}) \cdot Q^{1/3}[\text{nC}]\end{aligned}\quad (14.163)$$

关于上述光阴极电子枪注入器的定标定律，这里简短说明一下其应用。如前所述，定标定律是在给定一组已经优化后的参数为前提下，通过定标关系缩放，希望很快得到对不同参数区间的类似系统的其它相关参数评估。以 S 波段 1.6-cell 射频光阴极电子注入器为例，常见为 2856 MHz 1.6-cell 电子枪，随后紧跟螺线管，接着是一段真空漂移段，最后是直线加速器加速腔。现在假设一组优化后的典型参数为：电子束团电荷量 0.1 nC，初始 1.6-cell 加速腔的加速梯度为 120 MV/m，下游加速腔加速梯度约 28 MV/m。光阴极驱动激光为横向均匀分布（半径 0.25 mm），纵向平顶分布（半高全宽 8.5 ps）。现在如果想要设计一个 C 波段的射频光阴极电子注入器，则根据定标定律，如果选定加速腔谐振频率为 5.712 GHz 时，如果希望 C 波段电子注入器出口参数维持与 S 波段差不多时，则预计峰值加速梯度可增加两倍，为 240 MV/m 与 56 MV/m。根据定标定律，预期束团横纵向尺寸  $\sigma_{xf}, \sigma_{yf}, \sigma_{zf} \propto Q^{1/3}\lambda$  经过优化后应能维持与 S 波段设计差不多的结果。留意，定标定律仅考虑束流动力学效应；在工程实际中，加速梯度的选择往往还有其它限制，比如，加速腔金属结构的功率损耗、速调管能提供的功率上限等。因此，变换到不同频段时，由于工程实际的考虑，可能加速梯度或加速腔数目都会跟着改变。尽管如此，定标定律能够给设计者一个大致概念，从一个既有的、优化过的、成熟的工程设计开始，当过渡到新的频段或不同电荷量时，相关物理量在新设计中可预期的大致结果。

## 第十四章 补充习题

1. 将激光视为平面波，则激光功率、强度（单位面积的功率）、横向束斑尺寸与电场振幅可以互相关联。试推导其关系。对功率 1 MW、横向束斑  $\sigma_\perp = 10 \mu\text{m}$  激光，其电场振幅大约为何？
2. 将激光视为高斯束，假设在束腰位置有如上参数，写下距离束腰  $z$  处的电场振幅。
3. 高斯束与平面波都是完备基底，能够完整描述光场的时空分布，现将一高斯激光束电场以平面波为基底表示，写成如下

$$\mathbf{E}(x, y, z; k_z, \omega) = \frac{e^{-i\omega t}}{(2\pi)^2} \iint \tilde{E}(k_x, k_y) e^{ik_x x + ik_y y + ik_z z} \left( \hat{\mathbf{x}} - \frac{k_x}{k_z} \hat{\mathbf{z}} \right) dk_x dk_y$$

其中， $k_z \equiv (k^2 - k_x^2 - k_y^2)^{1/2}$ ， $k = \omega/c$ 。验证此式满足电场高斯定律，并求展开系数  $\tilde{E}(k_x, k_y)$ 。

**解** 考虑  $z = 0$  处，有

$$E_x|_{z=0} = \frac{e^{-i\omega t}}{(2\pi)^2} \iint dk_x dk_y \tilde{E}(k_x, k_y) e^{ik_x x + ik_y y} = E_0 e^{-i\omega t} e^{-(x^2 + y^2)/w_0^2}$$

通过逆傅里叶变换，

$$\tilde{E}(k_x, k_y) = E_0 \iint dx dy e^{-ik_x x - ik_y y} e^{-(x^2 + y^2)/w_0^2} = 4\pi E_0 w_0^2 e^{-(k_x^2 + k_y^2)w_0^2}$$

4. 目前实验室的激光系统为 800 nm、7 mJ 的激光。经过 1:9 分束，其中 10% 用作三倍频产生 266 nm 激光，利用 266 nm 激光在光阴极打出 10 pC、50 fs 电子束团，估算 1:9 分束是否足够？假设光阴极金属的量子效率（quantum efficiency, QE）为  $5 \times 10^{-5}$ ，激光脉冲时间长度与电子束一样。

