

# FELO のマスター方程式 MASTER EQUATION OF FELO

尾崎俊幸<sup>#</sup>  
Toshiyuki OZAKI<sup>#</sup>  
KEK

## Abstract

The free electron laser oscillator (FELO) can be modelled by the master equation. Using the well-known one-dimensional FEL equations, the diffusion-like master equation is already given and solved with approximations. This paper provides an exact solution using the convolution with Green's function. The simulations are performed using the parameters of Mark III FELO. Flattop electron bunches are injected and the evolutions of longitudinal structure are compared with the turns. The validity is discussed after the saturation. The concept for an XFEL using mirrors of crystals with the very narrow bandwidth is presented by K. -J. Kim. The proposed master equation is the same type as the time-dependent Schrodinger equation of harmonic oscillator. The solution is presented by using the popular method in Quantum Mechanics text-books. At last section, the quantum master equation for FELOs is discussed.

## 1. はじめに

量子レーザーの動作は、通常、マスター方程式で説明されている。これは、状態間の遷移を表す方程式である。一般的には、マスター方程式とは、巨視的な反応速度を、微視的に表した輸送の微分方程式である。

本論文では、自由電子レーザーの基本方程式からマスター方程式を導く。文献[1]では近似して拡散方程式にして議論されるが、本論文ではグリーン関数を用いて一般化された解について議論する。さらに、XFELではミラーが周波数特性を持つ。これを入れると、調和振動子を持つ時間依存のシュレディンガー方程式と同じ形の方程式になる。通常のテキストにあるように、定常シュレディンガー方程式の固有値と固有関数で級数展開して、その係数に時間依存を持たせて解を得る方法が、このマスター方程式に応用できる。最後に、量子 FELO の基礎になるであろう量子マスター方程式を議論する。

## 2. マスター方程式による FELO 理論

FELO でのマスター方程式を求める。まず、文献[1]に従って進めていく。FELO の出力波形が、round-trip 毎に変わっていく様子を検討する。

### 2.1 マスター方程式の導出

$z$  をバンチの重心のアンジュレーター内部の位置とし、 $s$  はバンチ内部の電子の位置とする。まず、その座標を、アンジュレーターの全長  $L_w = N\lambda_w$  で規格化する。

$$\bar{z} = \frac{z}{N\lambda_w} \quad \text{および} \quad \bar{s} = \frac{2\gamma_0^2}{N\lambda_w} s$$

コンプトン FEL の基本方程式は、1次元シミュレーションの場合には、 $n$  個の電子の運動方程式と電磁場成長の1式から成り立つ。前者は、電子のエネルギーと位相

のペアから成る微分方程式である。電磁場は、 $\bar{z}$  と  $\bar{s}$  の関数である。

$$\frac{d\gamma_j}{d\bar{z}} = i \frac{16\pi^2 N^2 a_w}{1+a_w^2} \hat{a} [\bar{s}_j(\bar{z}), \bar{z}] \exp(i\theta_j)$$

$$\frac{d\theta_j}{dz} = \gamma_j$$

である。電磁場の成長率は、

$$\frac{\partial \hat{a}}{\partial \bar{z}} = \frac{2\pi i a_w L_w r_e}{\gamma k_z} \delta n$$

である。

ローゲイン FEL の場合、電子ビームがアンジュレーターに入る時には均一分布であり、バンチされていない。進行するにつれ、ビームの位相空間での密度の変化  $\delta n$  から、電磁場が発生する。

文献[1]で、やや複雑な数式の展開の後に、 $n$  回パスの後の FEL の出口での出力増加は

$$\frac{\partial \hat{a}}{\partial n} = -\delta \hat{a} + \hat{a} \hat{G} - i \frac{\partial \hat{a}}{\partial \bar{s}} \frac{d\hat{G}}{dy_0} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \hat{a}}{\partial \bar{s}^2} \frac{d^2 \hat{G}}{dy_0^2}$$

ここで、 $y_0 = (k_w - k_z / 2\gamma_0^2) L_w$  である。

$\hat{G}$  は、複素ゲイン関数であり、

$$\hat{G}(y_0) = ij_c \int_0^1 d\bar{z} \exp(-iy_0 \bar{z}) \int_0^{\bar{z}} d\bar{z}' \int_0^{\bar{z}'} d\bar{z}'' \exp(iy_0 \bar{z}'')$$

である。ここで、結合係数

$$j_c = 8\pi N^3 \frac{I}{I_A} \frac{\lambda_w^2}{r_b^2} \frac{a_w^2}{\gamma^3}$$

を用いた。

第1項と2項は

<sup>#</sup> ozaki@post.kek.jp

$$\frac{\partial \hat{a}}{\partial n} = (-\delta + G)\hat{a}$$

で、 $\delta$  は空洞のロスである。当然ながら、ゲインがロスより高ければ増幅していくことが示されている。しかしながら、ゲイン  $G$  は、レーザー強度  $I$  に依存する関数である。例えば、文献[2]は

$$G(I) = \frac{g}{1 + (1 - \alpha)I/I_s + \alpha(I/I_s)^2}$$

を提案している。飽和を生み出す非線形項の探求が必要である。Single-pass FEL の場合では、ギンツブルグ・ランダウ方程式である[3]。

## 2.2 グリーン関数による解法

得られた方程式を簡略化する。

$$\frac{\partial \hat{a}}{\partial n} = D \frac{\partial^2 \hat{a}}{\partial \bar{s}^2} + E \frac{\partial \hat{a}}{\partial \bar{s}} + F \hat{a}$$

ここで、 $D = -\frac{1}{2} \frac{d^2 \hat{G}}{dy_0^2}$ ,  $E = -i \frac{d\hat{G}}{dy_0}$ ,  $F = -\delta + G$  とした。

このタイプの式で、1 次微分の項は、ドリフト又は対流を表す。2 次微分の項は拡散を表す。

フーリエ変換は

$$\hat{a}(\bar{s}, n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{a}(\bar{s}, n) \exp(ik\bar{s}) dk$$

で定義される。与式のフーリエ変換は

$$\frac{\partial \tilde{a}}{\partial n} = (-Dk^2 + iEk + F)\tilde{a}$$

この特解は

$$\tilde{a}(\bar{s}, n) = A(k) \exp\left((-Dk^2 + iEk + F)n\right)$$

初期条件は、 $n=0$  だから、

$$\hat{a}(\bar{s}, 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) \exp(ik\bar{s}) dk = \hat{f}_0(\bar{s})$$

であり、これから  $A(k)$  を求めて、与式に代入する。

ここでは、フラットな分布のビーム

$$\begin{aligned} \hat{f}_0(\bar{s}) &= 1 & (0 \leq \bar{s} \leq 1) \\ &= 0 & (\bar{s} < 0, 1 < \bar{s}) \end{aligned}$$

を初期条件にする。

与式の逆フーリエ変換を計算する。ここで、経路積分のテキストに出てくる方法を用いる[4]。つまり、指数関数の肩の部分の平方完成を目指して進める。肩の部分は、

$$\begin{aligned} &(-Dk^2 + iEk + F)n + i\bar{s}k \\ &= -Dnk^2 + (iEn + i\bar{s})k + Fn \\ &= -Dn \left( k - \left( \frac{iEn + i\bar{s}}{2Dn} \right) \right)^2 + \frac{(iEn + i\bar{s})^2}{2Dn} + Fn \end{aligned}$$

となる。

計算を見やすくするために、以下のように表現する

$$k - \frac{i(En + \bar{s})}{2Dn} = q$$

したがって、両辺の微分から  $dk = dq$  である。

$$C = \exp \left( -\frac{(En + \bar{s})^2}{2Dn} + Fn \right)$$

とおく。これは  $q$  には無関係であるから、積分の外に出る。

与式は、つまり、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-Dnq^2 + C) dq = C \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-Dnq^2) dq$$

であり、さらに、公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-Dnq^2) dq = \sqrt{\frac{\pi}{Dn}}$$

を利用して、グリーン関数として

$$\begin{aligned} Grn(\bar{s} - \bar{s}') &= \sqrt{\frac{\pi}{D \cdot n}} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{s}' \\ &\times \exp \left( -\frac{((E \cdot n)^2 + 2E \cdot n \cdot (\bar{s} - \bar{s}') + (\bar{s} - \bar{s}')^2)}{2D \cdot n} + F \cdot n \right) \end{aligned}$$

を得る。

したがって、マスター方程式の解は

$$\hat{a}(\bar{s}, n) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{a}(\bar{s}') Grn(\bar{s} - \bar{s}') d\bar{s}'$$

である。この式を数値計算する。

## 2.3 近似式の導入

複素ゲイン関数は、文献[3]により、

$$\begin{aligned} g &\equiv j_C \left[ \frac{2 - 2 \cos(x) - x \cdot \sin(x)}{2x^3} \right. \\ &\quad \left. + i \frac{2 \sin(x) - x - x \cdot \cos(x)}{2x^3} \right] \end{aligned}$$

であり、 $j_C$  はコルソン・パラメーターである。

ここからは、ゲインが最大になる付近だけの議論に限定する。以下のように近似式を使う。

$$\begin{aligned} \hat{G} &\approx (-0.0111y_0^2 + 0.0576y_0 - 0.007) \\ &\quad + i(0.0019y_0^2 - 0.046y_0 + 0.126) \end{aligned}$$

これは  $2.1 \leq y_0 \leq 3.1$  の領域でフィティングした式である。

以下、増幅がない条件で計算する。

ここで得たマスター方程式は、フォッカー・プランク方程式と同型であるが、ここで検討した式は、1次微分の係数が虚数であり、ゲイン関数も複素関数を用いたので、むしろ時間依存のシュレディンガー方程式に近い形である。

## 3. マスター方程式によるシミュレーション

稼働している装置の中から、スタンフォード大学で建設されて、ハワイ大学に移設した Mark III FEL0 を選び、検討を進める。

### 3.1 動作パラメーター

文献[5]から動作パラメーターを、Table 1 に引用する。

Table 1: Operation Parameters of Mark III

Beam energy	42 MeV
Beam current	30 A
Undulator parameter	1.0
Undulator period	2.3 cm
Number of period	47
Colson parameter	7.792
Laser wavelength	3.32 $\mu\text{m}$
Gain	1.17

### 3.2 数値計算

文献[1]では、 $y_0 \approx 2.6$ であるから、 $d\hat{G}/dy_0 \approx 0$ として、この項を消し、拡散方程式として近似しているが、ゲイン関数は複素数であり、虚数部が残る。本論文では、虚部も考慮する。

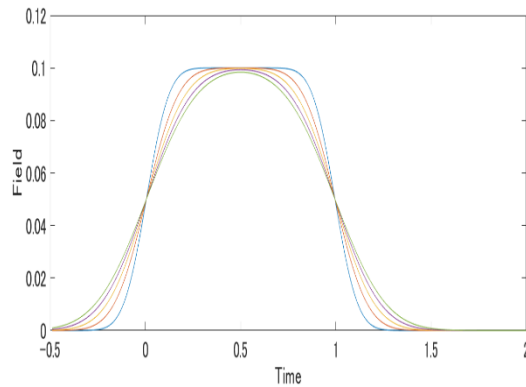


Figure 1: The temporal pulse shapes at the wiggler exit are shown in the electron beam frame. The radiation escapes from the electron pulse.

$\delta L = 0$  の場合を Fig. 1 に示す。ビームの位置は不動である座標系である。規格化時間の 0~1 の間だけ矩形波ビームがある。最初のシード光は矩形波である。Figure 1 の縦軸はフィールドの絶対値である。繰り返し数が、10、20、30、40、50 回目における出力波形の変化を示す。矩形から、時定数がある立ち上がりと下がりのある波形のようになっていく。光の振幅変動に応じて位相も動いている。光速度はビームより速いので、ビーム形状から前方に、つまり、図の左側に染み出るような形状となる。また、後述するように群速度の遅い成分が図の右側に出る。

### 3.3 文献との比較

文献[5]の図を、Fig. 2 として引用する。しかし、このシミュレーションで仮定した条件の説明がないので、比較が不可能な所がある。

アンジュレーターで発生した光は、ビームのバンチ形状と類似のパルス形状であり、波動としては、位相速度と

群速度で進む[6]。

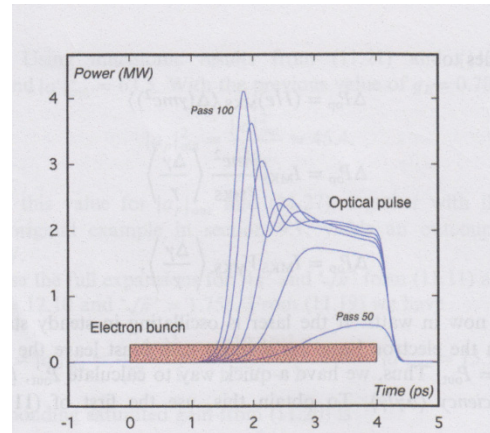


Figure 2: The optical pulse shapes between 50 pass and 100 pass are simulated and shown in ref. [5].

位相速度は

$$v_{ph} = c \left( 1 - \frac{\lambda_l}{4\pi\sqrt{3}L_{g0}} \right) \cong c$$

である。ここで、 $L_{g0}$  は、ゲイン・レングスであるが、第 2 項が極めて小さいので、実質、光速である。

ビームの平均速度は

$$\bar{v}_z = c \left( 1 - \frac{1}{2\gamma_r^2} \left[ 1 + \frac{K^2}{2} \right] \right)$$

であり、平均の群速度は

$$\bar{v}_g \approx c \left( 1 - \frac{1}{3\gamma_r^2} \left[ 1 + \frac{K^2}{2} \right] \right)$$

であり、その差は

$$\bar{v}_g - \bar{v}_z = \frac{c}{6\gamma_r^2} \left[ 1 + \frac{K^2}{2} \right]$$

であり、平均の群速度の方が速い。したがって、パルス状の波形は、前部が大きい波形になる。ここには、周波数分散があるので、遅い成分もあるので、ビームの後方に出る。

議論しているマスター方程式では、直接は群速度に関係する項はない。今後の研究になる。

### 3.4 デチューンの場合

文献[3]は、マスター方程式の 1 次微分係数  $E$  を、以下のように提案している。

$$E = \mu_c \left( i \frac{d\hat{G}}{dy_0} - \theta \right)$$

ここで、

$$\mu_c = \frac{N_w \lambda_s}{\sigma_z}, \quad \theta = \frac{4 \cdot \delta L}{g_0 N_w \lambda_s}$$

である。 $\sigma_e$  はバンチ長、 $\delta L$  は、ミラー間の距離から光波長の整数倍を引いた端数である。

デチューンがある場合には、初期条件

$$\hat{a}(\bar{s}, 0) = \exp(i\Delta\bar{s})$$

を前章の逆フーリエ変換の計算に入れることになる。

### 3.5 飽和の効果

飽和領域ではゲインがゼロ近い。また、シンクロトロン振動があり、出力の変動がある。さらには、サイドバンド不安定性がある。Mark III に合うような数値を試行錯誤し探した。

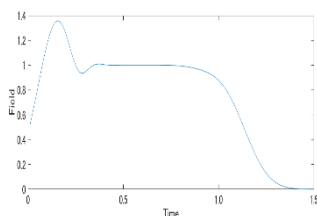


Figure 3: The spike in a pulse shape is shown by the intended change of imaginary parts.

$q$  の虚数部を大きくすると両端にオーバーシュートが出る。 $E$  に虚数部を導入すると片側のみオーバーシュートする波形となる。 $E = 0.25i$  とした場合を Fig. 3 に示す。

出力の飽和を過ぎるとサイドバンド不安定性があるので、パルス内部でのビームの移動があり、場所による電流密度に違いが出てきて、ゲイン傾きになると思われる。本来、ドリフトを与えるのは  $E$  項である。

### 3.6 シングル・パス FEL の場合との比較

Figure 4 は、文献[7]の引用である。これは、シングル・パス FEL の過渡応答に関する論文である。

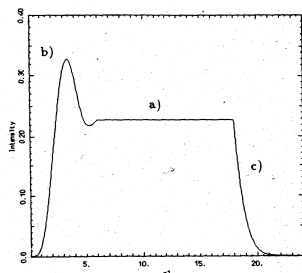


Figure 4: This similar pulse shape in the case of single-pass high-gain FEL is shown in ref. [7].

シングル・パス FEL では、バンチングが連続して進む。反して、FELO では、毎回、リフレッシュされたビームを利

用する。相当に異なる原理であるが、共通する物がある。

## 4. XFEL のマスター方程式

X 線領域にはロスが少ないミラーが存在しないため、長年、FELO の設計ができなかった。しかしながら、K.-J. Kim らが、ダイヤモンド結晶のバンドパス特性(ダーウィン曲線)を利用する提案をして、世界で検討している。

文献[8]に沿ってマスター方程式を求める。まず、進行する電場  $E(\tau)$ 、ここで  $\tau$  は進行方向である。ビームは、ガウシヤンの形状(半値幅  $\sigma_e$ )とする。電場は、FEL 相互作用で増幅される。

アンジュレーター出口では、

$$\left(1 + \frac{g}{2} e^{-\tau^2/2\sigma_e^2}\right) E(\tau) \approx \left(1 + \frac{g}{2} - \frac{g\tau^2}{2\sigma_e^2}\right) E(\tau)$$

となる。

さらに、ミラーの周波数特性を近似して

$$R(\omega) \approx (1 - \alpha/2) e^{-\omega^2/\sigma_\omega^2}$$

とする。 $\alpha$  は、ロスである。ミラーによって反射波は、その周波数特性と電場のスペクトルから

$$\int d\omega e^{i\omega\tau} R(\omega) E(\omega)$$

である。ミラーでの変化分は、

$$\left(1 - \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{\sigma_\omega^2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\right) E(\tau)$$

となる。空洞長によるデチューンは

$$\left(1 + l \frac{\partial}{\partial \tau}\right) E(\tau)$$

とする。以上を集めて、1回通行した後の増加分は

$$\frac{\partial}{\partial n} E(\tau, n) =$$

$$\left(\frac{1}{\sigma_\omega^2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + l \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2}(g - \alpha) - \frac{g}{4\sigma_e^2} \tau^2\right) E(\tau, n)$$

となる。これが、XFEL のマスター方程式である。

まずは、ここで、 $E(\tau, n) = A(\tau, n) e^{D\tau}$  を仮定して、

1次微分項の係数をゼロにするように置くと  $D = l\sigma_\omega^2/2$  になる。このようにして、

$$\frac{\partial}{\partial n} A(\tau, n) =$$

$$\left(\frac{1}{\sigma_\omega^2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{g}{4\sigma_e^2} \tau^2 + \frac{1}{2}(g - \alpha)\right) A(\tau, n)$$

を得る。これを解くには、上記を時間依存のシュレディンガー方程式と同じ形である事に注目して、調和振動子の項を持つ定常シュレディンガー方程式と同型の式を作る。

$$\left( \frac{1}{\sigma_\omega^2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{g}{4\sigma_\omega^2} \tau^2 \right) F_m(\tau) = K_m F_m(\tau)$$

を利用する。この解は、よく知られている直交関数で、

$$F_m(\tau) = \frac{N_m}{\sqrt{2^m m!}} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) H_m(s)$$

であり、ここで  $H_m$  は、 $m$  次のハンケル関数である。

$$s = (g)^{1/4} \sqrt{\sigma_\omega / \sigma_e} \tau$$

であり、 $N_m$  は規格化定数である。

ここで、 $\frac{1}{2}(g - \alpha)$  を、摂動項と解釈して、

$A(\tau, n)$  を求めるには、この直交級数で展開して

$$A_m(\tau, n) = \sum_k a_{mk}(\tau, n) \exp(-K_m \tau) F_k(s)$$

ここで、 $K_m = (m+1/2) \sqrt{g/4\sigma_\omega^2 \sigma_e^2}$  である。

これを、摂動の1次の式に代入して、

$$\frac{d}{dn} a_m(\tau, n) =$$

$$\sum_k \left[ \int_{-\infty}^{\infty} F_m(\tau') \left( \frac{1}{2}(g - \alpha) \right) F_k(\tau') d\tau' \right] \exp[-K_m \tau] a_k(\tau, n)$$

を得る。直交性を利用すれば、1つの項だけが残る。

$$\frac{d}{dn} a_m(\tau, n) = \sum_k \delta_{k,m} \left( \frac{1}{2}(g - \alpha) \right) \exp(-K_k \tau) a_k(\tau, n)$$

ゆえに、単純な一次微分方式から、解

$$a_m(\tau, n) = \exp\left[-\frac{1}{2}(g - \alpha)n\right] \exp(-K_m \tau)$$

を得る。ここで、初期値や右辺の振幅は最後の式の係数  $C_m$  に入るとし略した。以上をまとめると、XFELのマスター方程式の解は

$$E_m(\tau, n) = \exp(n\Lambda_m) \exp(-\tau\sigma_\omega^2 l / 2) \\ \times \exp\left[\frac{\sqrt{g}\sigma_\omega}{2\sigma_e} \tau^2\right] H_m\left[g^{1/4} \sqrt{\frac{\sigma_\omega}{\sigma_e}} \tau\right]$$

ここで

$$\Lambda_m \equiv \frac{1}{2} \left[ (g - \alpha) - \sigma_\omega^2 l^2 / 2 - \sqrt{g} (2m+1) / \sigma_e \sigma_\omega \right]$$

である。これは、文献[8]に出ている式に一致する。

電場はモードで表現できて、

$$E(\tau, n) = \sum_{m=1} C_m E_m(\tau, n)$$

係数  $C_m$  は初期値から決まる。つまり、

$$E_{seed}(\tau, 0) = \sum_{m=1} C_m E_m(\tau, 0)$$

において、 $\tau = m\Delta\tau$  と細分化した連立方程式から係数  $C_m$  が求まる。

## 5 量子マスター方程式

量子状態は、フォン・ノイマンの式

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]$$

で表現され、密度演算子(行列)  $\rho(t)$  がハミルトニアンにより変化する事を表す。

FELのハミルトニアンは、文献[9]により、以下の式

$$H = p_z^2 / 2m + \hbar\omega(a_L^\dagger a_L + a_W^\dagger a_W) + i\hbar g(a_L^\dagger a_W e^{-ikz} - h.c.)$$

になる。ここで  $a_L$  はレーザー、 $a_W$  はウイグラー、 $p_z$  と  $z$  は、電子の運動量と座標であり、演算子であり、以下の交換関係

$$[a_L, a_L^\dagger] = 1, [a_W, a_W^\dagger] = 1, [z, p_z] = i\hbar$$

を満たす。

量子 FELO でもマスター式を導出できるはずであり、検討を進める。

## 参考文献

- [1] G. Shvets and J.S. Wurtele, "Frequency shifting in free-electron lasers", *Phys. Plasmas*, Vol.1, pp. 157-166, 1994.
- [2] G. Dattoli, S. Cabrini, L. Giannessi, V. Loreto and C. Mari, "Gain saturation in free-electron lasers", *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A*, Vol. 318, pp. 495-499, 1992.
- [3] G. Dattoli, A. Renieri and A. Torre, *Lectures on the free electron laser theory and related topics*, World Scientific, 1993.
- [4] 和田純夫, "ファインマン経路積分", 講談社, 2014.
- [5] Eric B Szarmes, *Classical Theory of Free-Electron Laser*, Morgan & Claypool, 2014.
- [6] P. Schmüser, M. Dohlus and J. Rossbach, *Ultraviolet and Soft X-Ray Free-Electron Lasers*, Springer, 2008.
- [7] R. Bonifacio, L. De Salvo Souza, P. Pierini and N. Piovella, "The Superradiant Regime of a FEL: Analytical and numerical results", *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A*, Vol. 296, pp. 358-367, 1990.
- [8] R. R. Lindberg, K.-J. Kim, "Mode Growth and Competition in the X-ray Free Electron Laser Oscillator Start-up from Noise", in *Proc. FEL08*, Gyeongju, Korea, Aug. 2008, pp. 32-35.
- [9] R. Bonifacio, "Coherent Status of a Free Electron Laser", *Opt. Commun.*, Vol. 32, pp. 440-442, 1980.