量子 FEL の研究

STUDY ON QUANTUM FEL

尾崎俊幸#
Toshiyuki Ozaki#
Carpio AI

Abstract

The study on quantum free electron laser (QFEL) will be presented. The spectrum of QFEL is composed by a single narrow line, while SASE FELs provide spiking behavior. QFEL will provide a huge improvement in coherence. First, we discuss an FEL by a single electron. Second, we discuss many electrons case. Last section, we discuss a possibility on quantum enlargement in an FEL.

1. はじめに

自由電子レーザー(FEL)は 1971 年に、M.J. Madey が提案した[1]。ここでは量子力学で議論している。その後の約 10 年も、量子力学で多くの論文が提出された。文献[2]の Madey の論文によるゲインの計算式、つまり、

$$\bar{G}_{\max} = \frac{36.8\left(\dfrac{r_0^2}{hc}\right)\lambda_f^2\lambda_q^2 B_0^2\rho_{e0}\left(\dfrac{h\nu_f}{\gamma mc^2}\right)}{\left[\left(\dfrac{\Delta\gamma}{\gamma}\right)^2+\left(\dfrac{\Delta\nu}{2\nu_0}\right)^2\right]}F_f \quad .$$

この式の上部、そこの分母と分子のプランク定数 h がキャンセルし、古典力学で記述できる事が判明し、加速器による装置が急激に進展した。他方、量子 FEL は、理論研究のみが進んだ。

古典力学領域と量子力学領域の境は、量子 FEL パラメーター $\bar{\rho}$ によって決まる。これは、フォトン1個の反跳運動量と飽和時の電子の運動量の拡がりとの比である。$\bar{\rho}\le 1$ の場合に量子効果が表れる。

量子 FEL パラメーターは、文献[3]において

$$\bar{\rho} = \rho\frac{mc\gamma}{\hbar k_r} = \gamma\rho\frac{\lambda_r}{\lambda_c}$$

で与えられる。ここで、ρ は、従来の古典力学の FEL パラメーターであり、λ_r は放射波長、λ_c はコンプトン波長である。

提案されている量子 FEL において、 文献[4]は、レーザーアンジュレーターを採用している。その共鳴条件は

$$\lambda_r = \lambda_0\left(1+a_0^2+X\right)/4\gamma_r^2$$

となる。ここで、分母の4は、レーザーアンジュレーターを用いている事を示している。ここで、$X = 4\gamma_r\lambda_c/\lambda_0$ であり。電子の反跳の効果である。

図 1 で、レーザー波長に対して、$\bar{\rho}=100$ 、$\bar{\rho}=1$ 、$\bar{\rho}=0.4$ の電子の大きさ(確率分布)を示している[5]。$\bar{\rho}$ が小さくなると、SASE のスパイク状の波形が周期性を帯びるようになる。$\bar{\rho}<<1$ で、量子 FEL となる。

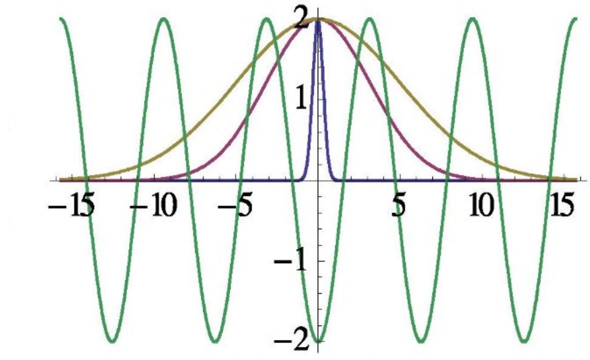

Figure 1: Electron probability distribution in the ponderomotive potential (green) for different values of the quantum FEL parameter. This figure is derived from ref. [5].

2. 電子1個の量子 FEL 方程式

電子とともに運動する座標系、Bambini-Renieri 座標系、$k_W = k_L = k$ である座標系で議論する。電子はゆっくりした速度で動く。

ベクトル・ポテンシャル A で表される電磁場の中での電子の運動のハミルトニアンは、

$$H = \frac{1}{2m_e}\left(p-eA\right)^2$$
$$= \frac{1}{2m_e}p^2 - \frac{e}{m_e}\left[A\cdot p + p\cdot A\right] + \frac{e^2}{2m_e}A^2 \quad .$$

通常の FEL 動作では、A^2 は、定数であるから、ゲージ変換で、波動関数の位相の項に含まれる。

波動関数 ψ に対し、第 2 項は、

$$p\cdot A\psi = \left(p\cdot A\right)\psi + \left(A\cdot p\right)\psi$$

であるが、$p=-i\nabla$ とクーロンゲージ条件の $\nabla\cdot A = 0$ とを利用して、

$$H = \frac{1}{2m}p^2 - \frac{e}{m}A\cdot p$$

carpio.ai.185@gmail.com

となる[6]。

2.1 シュレディンガー方程式モデル

2.1.1 二準位モデル

回転波近似を用いて、2 準位レーザーとして近似できる。2 準位モデルが成立する。図 2 に示す[7]。

$$\left|\psi(t)\right\rangle \equiv \psi_e(t)\left|e\right\rangle + \psi_g(t)\left|g\right\rangle .$$

最初は、ポンピングされているので、$\left|\psi_e(0)\right| = 1$ および $\left|\psi_g(0)\right| = 0$ であるが、動作開始後、前者が減り、後者が増加する。

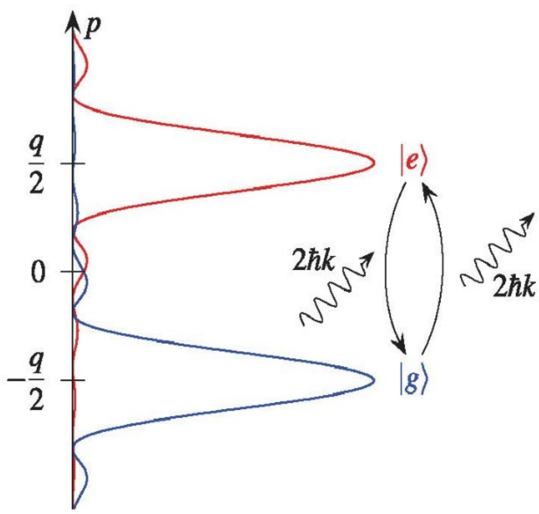

Figure 2: This figure shows two-level model of QFE, which is derived from ref. [7].

図 2 の縦軸は、電子の運動量である。励起状態$|e\rangle$から$2\hbar k$ の放射があり、基底状態$|g\rangle$に落ちる。その後は、ラビ振動をする。

2.1.2 Bambini-Renieri 基準座標系

Bambini-Renieri 基準座標系では、$k_L = k_W$ が成立する。$[\ ]_{Lab}$ は実験室系を意味する[8]。

無次元時間

$$\tau = \left(\frac{c}{L_u}\right)t$$

を導入して、 シュレーディンガー方程式は、

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\bar{z}^2} + \bar{\Omega}\cos\left(2\bar{k}\cdot\bar{z}\right)\psi$$

ここで、 $\bar{z} = \dfrac{z}{\sqrt{\lambda_c L_u}}$ $\qquad \bar{k} = k\sqrt{\lambda_c L_u}$

である。FEL 振り子の方程式は、

$$\dot{s} = p \qquad \dot{p} = 2\bar{k}\bar{\Omega}\sin\left(2\bar{k}s\right)\exp\left(-\frac{\bar{k}^2}{\zeta}\right)$$

となる。

まず、摂動の無い定常の式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)$$

であり、電子の初期状態を

$$\psi(z, t=0) = e^{ik_{0x}z}\exp\left[-\frac{(z-x_0)^2}{2\sigma_0^2}\right]$$

として、その時間発展は、ユニタリー変換により、

$$\psi(z,t) = U(t)\psi(z, t=0)$$

と表現される。

2.2 SO 法による数値計算

非線形項 $\cos\left(2\bar{k}\bar{z}\right)$ を含むので、単純な解析はできない。数値解析も工夫がいる。Split Operator (SO)法と呼ばれる最低次の Symplectic integrator (SI)を用いる[9]。

ハミルトニアンで表現して、

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$$

ここで、

$$H = H_0 + G$$

とした。形式解は

$$\psi(t) = e^{-iHt/\hbar}\psi(0)$$

である。

これを、分割演算子法(split operator method)と呼ばれる方法で数値計算する。まず、大域的時間間隔の領域 $[0, t]$を、$N\Delta t = t$ に分け、短い時間間隔 Δt の伝搬演算子の積で表す。つまり、

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-iH\Delta t/\hbar}e^{-iH\Delta t/\hbar}\cdots e^{-iH\Delta t/\hbar}$$

である。

次に、Baker-Campbell-Haussdorf 公式を利用する。

$$e^A e^B = e^C$$

とした場合、

$$C = A + B + \frac{1}{2}[A, B]$$

$$+\frac{1}{12}[[A, B], B] + \frac{1}{12}[[B, A], A] + \ldots$$

である。

本問題では

$$A = H_0 \quad B = G$$

であるから、

$$e^{H_0+G} \approx e^{H_1}e^{G}$$

であり、誤差は

$$\frac{1}{2}[H_0, G]$$

であるが、演算子を対称な表現、

$$e^{H_0+G} \approx e^{H_0/2}e^{G}e^{-H_0/2}$$

にすると、その誤差が減る。

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right] \approx \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_0\Delta t\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}G\Delta t\right]\exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_0\Delta t\right].$$

ここで、演算子 $\hat{z}$ を、時間 t における平均値 $\bar{z}$ としている。第 1 項と 3 項は、演算子（q 数）のままであるが、フーリエ変換で叩き込み積分し、波数空間で演算をして、逆フーリエ変換して、c 数にする。

2.3 電子 1 個からのアンジュレーター放射実験

上記の計算方法と実験結果を比較したい。電子 1 個を作る方法は 2 つある。シカゴのように電子銃のダークカレントから作る方法[10]、リングのビームをキッカーで減らす方法である。

後者は、文献[11]のように、VEPP-3 リング（周長 74.7 m エネルギー350 MeV）のオプチィカル・アンジュレーター（66 周期）からの電子1個の放射を観測を計測した報告がある。また、文献[12]のように、ストレージ・リングに電子 1 個を保持し、そのアンジュレーター放射を観測していている。

3. 多数電子による QFEL モデル

3.1 ボソン近似

電子はフェルミオンであり、パウリの原理に従う。つまり、同一の1粒子状態 2 個以上の粒子が占有することは許されない。その統計性の制約が計算を難しくする。ボソン系の方が、取り扱いが易しいので、フェルミオン系の波動関数をボソン系 c_{im} に写像して扱うのが、ボソン展開法である[13]。量子 FEL モデルでも、ボソンで理論を進めている[4]。

フェルミオン N 個の粒子が、準位1または準位2にあるとする。その各準位は、

$$m = -j, -j+1, -j+2, ...j-1, j$$

の $(2j+1)$ 個の準位に縮退しているとする。

ここで、粒子数 N と準位の縮退度とが等しいような系を考える。つまり、$N = 2j+1$ とする。

$c^{\dagger}_{im}$、c_{im} を準位 i =1 または i=2 における粒子の生成・消滅演算子とする。m は角運動量の z 成分である。

i=1 の準位は、完全に占有され、i=2 の準位は、完全に空いているとする。これを基底状態とする。

ここで、新しい演算子を導入する。つまり、

$$a^{\dagger}_m = c^{\dagger}_{2m} \quad a_m = c_{2m} \quad b^{\dagger}_m = c_{1m} \quad b_m = c^{\dagger}_{1m}$$

とする。$a^{\dagger}_m$ a_m は、準位2における電子の生成・消滅演算子であり、$b^{\dagger}_m$ b_m は、準位1における空孔の生成・消滅演算子である。

真空 $|0\rangle$ は、

$$a_m|0\rangle = b_m|0\rangle = 0$$

である。

ここで、次の式で定義される演算子を導入する。

$$S = (S_x, S_y, S_z)$$

$$S_+ = \sum_{m=-j}^{j} a^{+}_m b^{+}_m \qquad S_- = \sum_{m=-j}^{j} b_m a_m$$

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \qquad S_x = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)$$

個数演算子は

$$\hat{n}_p = \sum_{m=-j}^{j} a^{+}_m a_m \qquad \hat{n}_h = \sum_{m=-j}^{j} b^{+}_m b_m$$

で、準位 2 における粒子数、準位1における空孔数を示す。

$$S_z = \frac{1}{2}(\hat{n}_p + \hat{n}_h - N)$$

として、

$$[S_x, S_y] = iS_z \quad [S_y, S_z] = iS_x \quad [S_z, S_x] = iS_y$$

が成立する。これらは、スピン角運動量演算子と呼ばれている。

3.2 FEL ブロッホ方程式

論文では、ヘリカル・アンジュレーターにおける回転運動を議論する。電子と場の結合演算子 $\hat{R}$ を作る。これはシュインガー演算子と呼ばれる。

外部磁場と変動する磁場による物理量 $\hat{R}$ の運動は、ハイゼンベルク方程式に支配される。さらに、上記の論理で、ボソンの交換関係を利用する、詳細な計算は文献[14]で示す。最後に量子・擬ブロッホ方程式を得る。

$$\frac{dR}{dt} = R \times \Omega - i\omega DR$$
$$R \equiv (R_1, R_2, R_3) \quad .$$

3.3 外界との取り合い

現実には多数の粒子から出来ていて、また個々の粒子は、熱浴に接している。スピン系のエネルギーは、他の自由度に移っていく。この速度の目安として、緩和時間を導入する必要がある。

磁気モーメントの場合のブロッホ方程式の方法は確立されている[15]。以下の式で、T_1 を縦緩和時間と言う。スピンと外界の相互作用による。T_2 を横緩和時間と言う。スピン・スピンの相互作用による。

$$\frac{dR_1}{dt} = [R \times \Omega]_1 - \frac{R_1}{T_2}$$

$$\frac{dR_2}{dt} = \left[R \times \Omega\right]_2 - \frac{R_2}{T_2}$$

$$\frac{dR_3}{dt} = \left[R \times \Omega\right]_3 - \frac{R_3 - R_0}{T_1}.$$

おそらく、これに類似の FEL ブロッホ方程式が成立するだろう。T_1 は、上位と下位のエネルギー移動であり、T_2 は、スリッページを表すと考えられる。R_0 は初期エネルギーである。R_0 は、NMR における初期磁化 M_0 に相当するだろう。

4. 量子 FEL の設計

量子 FEL を実現するために、システムのパラメーターが検討されている[4]。これを表1に示す。

Table 1: QFEL System Parameters

Parameter	Symbol /unit	Value
FEL-parameter	ρ	6.6×10^{-5}
Radiation wavelength	nm	0.2
Laser wiggler wavelength	μm	1
Laser power	TW	2
Electron beam	γ	36

レーザーウイグラーを採用するので、電子加速器は約 18 MeV で済む。しかしながら、電子銃のスペックが厳しく、要求されるパラメーターを表 2 に示す。

Table 2: Electron Gun Design for QFEL

Parameters	Unit	Value
Peak current	A	3058
e-beam radius	mm	10
Bunck length	mm	97.3
emittance	mm-mrad	0.05

最近の開発、文献[16]によれば、$\varepsilon_n = 1nmrad$ 、$\sigma_s = 25\mu m$ 、電子数 $N_e = 10^6 \sim 10^7$ が報告されている。

Table 3: QFEL Performance

Parameter	Symbol/Unit	Value
QFEL parameter	$\bar{\rho}$	0.2
Gain length	L_g /mm	1.47

性能を表3に示す。通常の FEL のようにゲイン長の 10 倍強が飽和長だと理解すれば、長さ 2 cm がウイグラー(アンジュレーター)の全長である。

5. ウィグナー関数の導入

波動関数 ψ を場の演算子 $\hat{\psi}$ として、第 2 量子化する。まず、直交条件を

$$\left[\hat{\psi}(\theta), \hat{\psi}(\theta')\right] = \delta(\theta - \theta')$$

規格化条件を

$$\int_0^{2\pi} \hat{\psi}^+(\theta)\hat{\psi}(\theta)d\theta = \hat{N}_e$$

とする。ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N_e} \frac{\hat{p}_j^2}{2\bar{\rho}} - \delta\hat{a}^\dagger\hat{a} - i\sum_{j=1}^{N_e}\sqrt{\frac{\bar{\rho}}{N_e}}\left[\hat{a}e^{i\hat{\theta}_j} - \hat{a}^\dagger e^{-i\hat{\theta}_j}\right]$$

である。級数を仮定する。

$$\hat{\psi}(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{c}_n u_n(\theta).$$

ここで、級数

$$u_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta}$$

を用いる。 直交条件は、

$$\left[\hat{c}_n, \hat{c}_m{}^\dagger\right] = \delta_{n,m}$$

である。

この場に対するハイゼンベルク方程式は

$$i\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial\bar{z}} = -\frac{1}{2\bar{\rho}}\frac{\partial^2\hat{\psi}}{\partial\theta^2} + i\sqrt{\frac{\bar{\rho}}{N_e}}\left[\hat{a}^\dagger e^{-i\hat{\theta}} - \hat{a}e^{-i\hat{\theta}}\right]\hat{\psi}$$

$$\frac{d\hat{a}}{d\bar{z}} = \sqrt{\frac{\bar{\rho}}{N_e}}\int_0^{2\pi} d\theta\hat{\psi}(\theta)^\dagger e^{-i\hat{\theta}}\hat{\psi}(\theta) + i\delta\hat{a}$$

である。

ウィグナー関数は

$$W_m(\theta, \bar{z}) = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta' e^{-2im\theta'}\psi^\dagger(\theta - \theta', \bar{z})\psi(\theta + \theta', \bar{z})$$

を得る。これから、量子 FEL の性質を理解する重要な基礎方程式である。

6. QFEL における“量子もつれ”

6.1 問題設定

量子もつれは、現代物理学において、非常に重要な話題である。文献[17]は、XFEL での1個の電子から出た2個の光子が量子もつれを起こしている事を予言している。そこでは、電子ビームがディラック方程式に従うとして議論している。

ここでは、反対に、1つの光子から電子・陽電子になる場合を考える。

ヘリカル・アンジュレーターの中で、光子から電子・陽電子が対発生したとする。擬電磁場が、この2つに衝突したとする。擬電磁場は、ヘリカル・アンジュレーター磁場がローレンツ変換された場であり、弾性散乱であり、エネルギー移行がないので、角運動量の和はゼロである。回転運動の右回りを l_R として、左回りを l_L とする。擬電磁場は、電場と磁場の大きさは等しくないので、スパイラルに運動して、対消滅は起きない。この状態は

$$|\psi\rangle_{RL} = \frac{|l_R\rangle_{Z+}|l_L\rangle_{Z-} + |l_L\rangle_{Z+}|l_R\rangle_{Z-}}{\sqrt{2}}$$

と表される。プラスにしたのは、固有スピン(フェルミオン)ではなく、単なるサイクロトロン回転(ボソン)であるからで

ある。

通常は

$$|\psi\rangle_{two\_body}=\frac{\left(|l_R\rangle\pm|l_L\rangle\right)_{z-}\left(|l_R\rangle\pm|l_L\rangle\right)_{z+}}{2}$$

のように、q ビットの積で表せる。しかし、$|\psi\rangle_{RL}$ は、q ビットの積で表せない。つまり、エンタングルしている[18]。

EPR 問題は、2 個の電子を議論する。しかし、電荷は議論されない。クライン・ゴルドン方程式を用いて物質波として進む。

6.2　ウィグナー方程式

最初に角運動量状態の変動 Δp_θ があり、次に磁場が無くなると、回転は消え、進行方向の運動量の変動 Δp_z を起こす。基準系より速い電子と基準系より遅い陽電子となる。その運動量を p_z と $-p_z$ とする。

1 次元の 2 個の電子のウィグナー方程式は 文献[19]によれば

$$\frac{\partial}{\partial t}f_W\left(x_1,x_2;p_1,p_2;t\right)+\frac{p_1}{m}\frac{\partial f_W}{\partial t}+\frac{p_2}{m}\frac{\partial f_W}{\partial t}$$
$$=\int dp_1'\int dp_2' f_W\left(x_1,x_2;p_1+p_1',p_2+p_2':t\right)V_W$$

ここで、

$$V_W\left(x_1,x_2;p_1,p_2;t\right)=\frac{i}{\pi^2\hbar^3}\int dx_1'\int dx_2'$$
$$\times\exp\left(-\left(\frac{2i}{\hbar}\right)\left(x_1'p_1+x_2'p_2\right)\right)$$
$$\times\left[V\left(x_1+x_1',x_2+x_2'\right)-V\left(x_1-x_1',x_2-x_2'\right)\right]$$

V は、空間電荷ポテンシャルである。 初期条件を

$$f_W^0\left(x_1,x_2;p_1,p_2\right)=N\exp\left(-\left(\frac{x_1-x_1^0}{\sigma}\right)^2\right)\exp\left(-\left(\frac{x_1-x_1^0}{\sigma}\right)^2\right)$$
$$\times\exp\left(-\left(p_1-p_1^0\right)^2\sigma^2\right)\exp\left(-\left(p_2-p_2^0\right)^2\sigma^2\right)$$

として摂動論で解いていく。

上記の波動関数を、物質波で置き換え、陽電子を取り込む。ウィグナー分布を求め、これをプロットし、負となる領域が、”量子もつれ”である[20]。

参考文献

[1] M.J. Madey, “Stimulated emission of bremsstrahlung in a periodic magnetic field “, J. Appl. Phys, 42, (1971)1906.

[2] J. M. J. Madey, H. A. Schwettman and W. M. Fairbank, “A FREE ELECTRON LASE”, IEEE PAC(1981) 980~982.

[3] R. Bonifacio, M. Ferrario, G. R. M. Robb, N. Piovella, A. Schiavi, and L. Serafini, “QUANTUM SASE FEL WITH A LASER WIGGER”, Proceedings of the 27th International Free Electron Laser Conference, 71~74.

[4] luca volpe, “3D Quantum theory of Free Electron Laser”, LAMBERT Academic Publishing (2010).

[5] Petr M. Anisimov, “QUANTUM NATURE OF ELECTRONS IN CLASSICAL X-RAY FELS”, Ptoceedings of FEL2015, Daejeon, Korea, 338-341.

[6] H. Gharibnejad, B. I. Schneider, M. Leadingham, H. J. Schmale, “A Comparison of numerical approaches to the solution of the time-depend Schrodinger equation in one dimension”, Comput. Phys. Commu, 252(2020)106808.

[7] P. Preiss, R. Sauerbrey, M. S. Zubairy, R. Endrich, E. Giese, P. Kling, M. Knobl, and W. P. Schlerch, “THEORY OF THE QUANTUM FEL IN A NUTSHELL”, Proceedings of FEL2012, Nara, Japan, PP93~96.

[8] H. Gharibnejad, B. I. Schneider, M. Leadingham, H. J. Schmale, “A Comparison of numerical approaches to the solution of the time-depend Schrodinger equation in one dimension”, Comput. Phys. Commu, 252(2020)106808.

[9] Paul L. DeVries, “The time evolution of the hydrogen wavefunction in intense laser fields”, Comput. Phys. Comm. 63(1991) 95-99.

[10] A. Halavanau, D. Seipt, I. Lobach, T Raubenheimer, S. Nagaitserv, Z. Hungang, C. Pellegrini, “UNDULATOR RADIATION GENERATED BY a SINGLE ELECTRON”, IPAC 2019, Melboune,, Australia, pp1867~18.

[11] I.V. Pinayev, V.M. Popik, T.V. Shaftan, A.S. Sokolov, N.A. Vinokurov, P.V. Vorobyov, “Experiments with undulator radiation of a single electron”, Nucl. Instru. & Methods A341(1994)17~20.

[12] I. Lobach, S. Nagaitsev, A. Romanov, A. Shemyakin, “EXPERIMENTS WITH UNDULATOR RADIATION EMITTED BY A SINGLE ELECTRON”, IPAC2022, 1628~1631.

[13] 高田健次郎、“ダイソン型ボソン展開法”、物理学最前線21、共立出版(2018 年).

[14] Toshiyuki Ozaki, “BLOCH VECTOR MODEL ON FEL”, PASJ2023, Funabashi, Japan, Aug. 2023, TUP25, this meeting.

[15] 岡本良治、“スピンと角運動量:量子の世界の回転運動を理解するために”、共立出版(2014 年).

[16] B. h. Schaap, S. Schouwenaars, O. J. Luiten, “PROPOSAL FOR A QUANTUM FREE ELECTRON LASER DRIVEN BY ULTRA COLD ELECTRON “, 40th International Free Electron Laser Conference, Trieste, 13~15.

[17] Linfeng Zhang, Zungi Li, Dongyu Liu, Chengyin Wu, Haitan Xu, and Zheng Li, “Entangled X-Ray Photon Pair Generation by Free-Electron Lasers”, Phys. Rev. Lett. 131(2023) 07360.

[18] 佐藤文隆、“佐藤文隆先生の量子論:干渉実験・量子もつれ・解釈問題”、講談社(2017).

[19] J. M. Sellier, I. Dimov, “The many-body Wigner Monte Carlo method for time-depend ab-initio quantum simulations”, J. Comput. Phys. 273(2014) 589.

[20] 古澤明、“量子光学の基礎”、内田老鶴圃、2013 年.