

**Влияние динамики теплового  
самовоздействия мощных импульсов в  
кристалле на монохроматизацию излучения  
рентгеновского лазера на свободных  
электронах**



**В.А. Бушуев**

*Московский государственный университет  
им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*  
e-mail: [vabushuev@yandex.ru](mailto:vabushuev@yandex.ru)

**“Рентгеновская оптика - 2012”**

**ИПТМ, Черноголовка - 2012**

# Общая временная структура импульсов XFEL

Hard X-ray (SASE1 and SASE2)

Wavelength: 0.05 – 0.16 nm

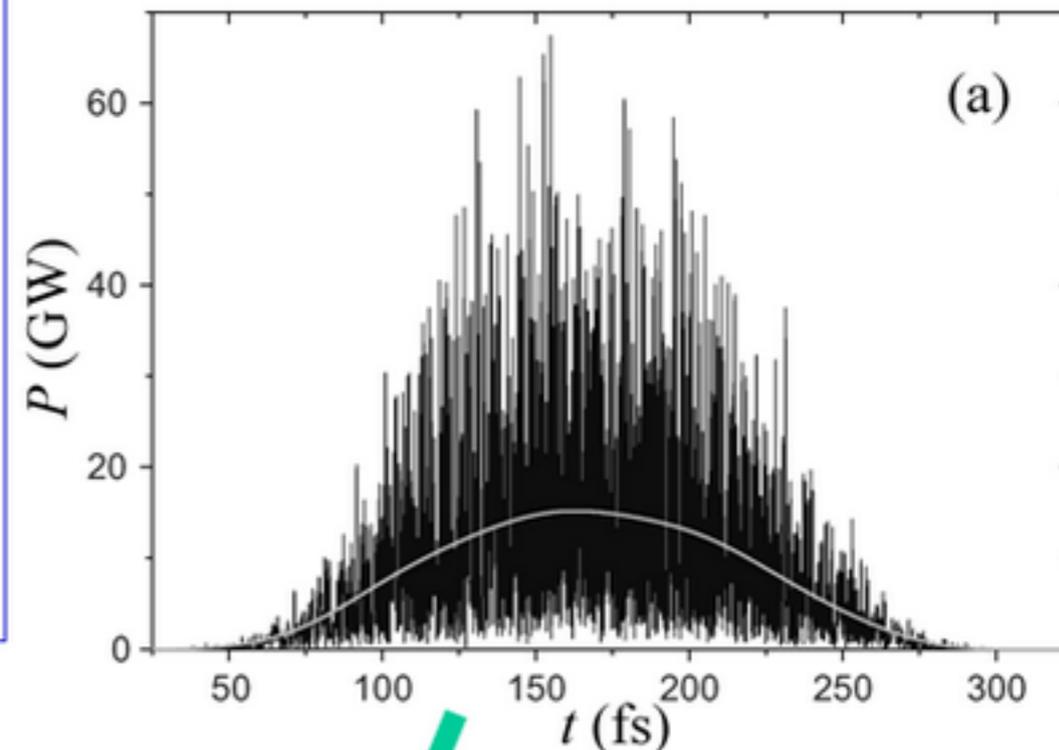
Bunch charge: 0.02 – 1 nC !!

Photons/pulse:  $(0.1 - 20) \times 10^{11}$

Pulse Energy: 20 – 2500  $\mu\text{J}$

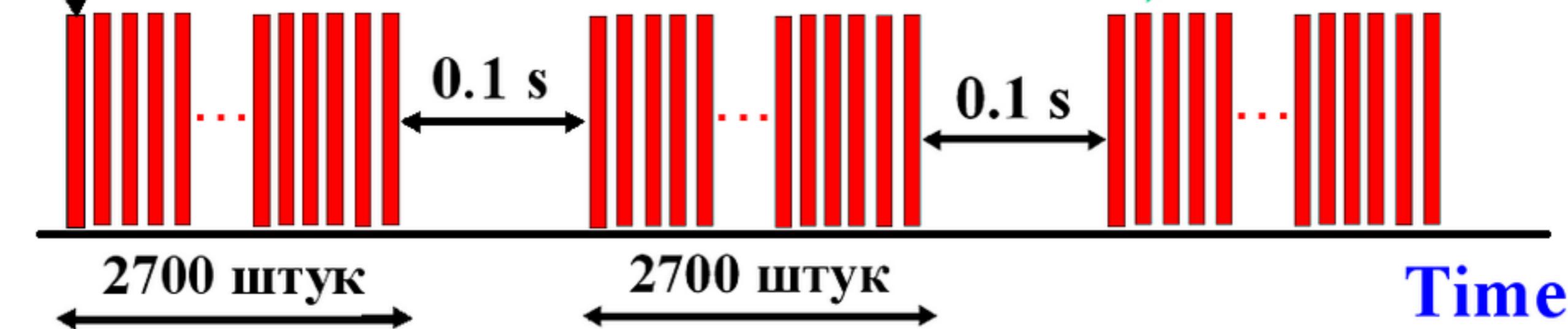
Average power: 0.7 – 70 W

$$\Delta E/E \approx 10^{-3}$$



10-100 fs

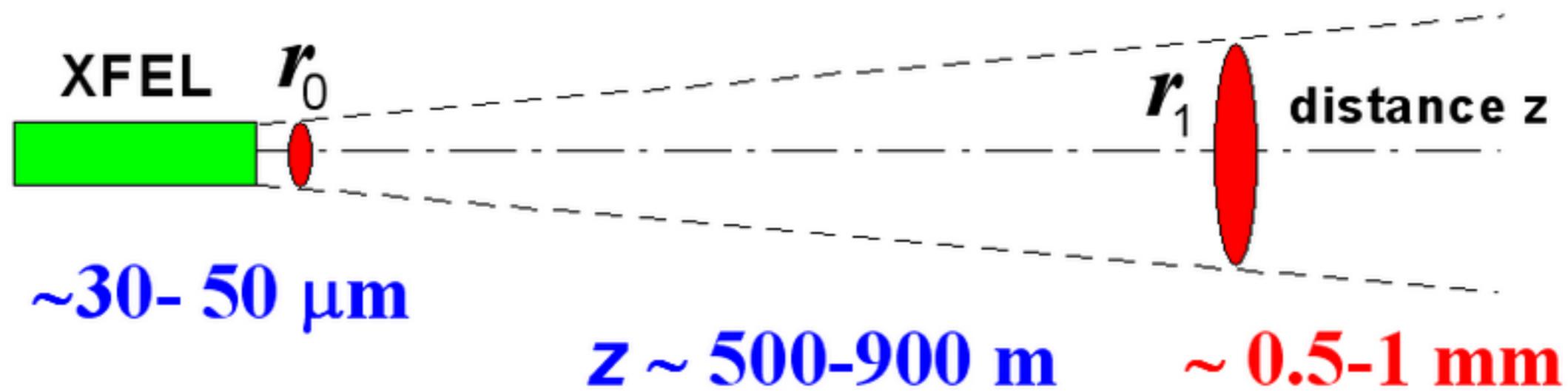
XFEL SASE-I



**Table 6: Hard X-ray (SASE1 and SASE2) FEL radiation parameters for selected settings.**

Parameter	Unit	Value								
Photon energy	keV	7.75			12.4				15.5	
Radiation wavelength	nm	0.16			0.10				0.08	
Electron energy	GeV	14			14				14	
Bunch charge	nC	0.02	0.25	1	0.02	0.25	1	0.02	0.25	1
Peak power	GW	46	37	24	35	24	12	29	15	9
Average power	W	2	23	69	2	15	34	1	9	27
Source size (FWHM)	μm	31	39	46	29	37	49	29	35	54
S. divergence (FWHM)	μrad	2.8	2.3	1.9	1.9	1.5	1.3	1.5	1.3	1.0
Spectral bandwidth	1E-3	2.3	1.9	1.4	1.9	1.4	1.0	1.6	1.3	0.8
Coherence time	fs	0.16	0.20	0.27	0.13	0.17	0.23	0.12	0.15	0.23
Coherence degree		0.96	0.96	0.91	0.95	0.91	0.71	0.96	0.84	0.57
Photons/pulse	1E11	0.6	7.0	20.7	0.3	2.8	6.4	0.2	1.4	4.0
Pulse energy	μJ	76	864	2570	58	549	1260	49	347	991
Peak brilliance	1E33*	2.38	2.41	1.96	3.54	3.7	1.6	4.26	2.46	1.6
Average brilliance	1E23*	1.1	15.1	56.8	1.6	19.9	46.4	1.9	15.5	46.2

\* In units of photons/(mm<sup>2</sup> mrad<sup>2</sup> 0.1% bandwidth s)



**Угловая расходимость:  $\sim 1-3 \mu\text{rad} = 0.2-0.6 \text{ arcsec}$**

**Уменьшение  
плотности энергии:**

**Средние потоки энергии:**

$W \sim 60 \text{ Вт/см}^2 - 80 \text{ кВт/см}^2$

$$\left( \frac{1 \text{ mm}}{50 \mu\text{m}} \right)^2 = 400$$

# ...Для сравнения:

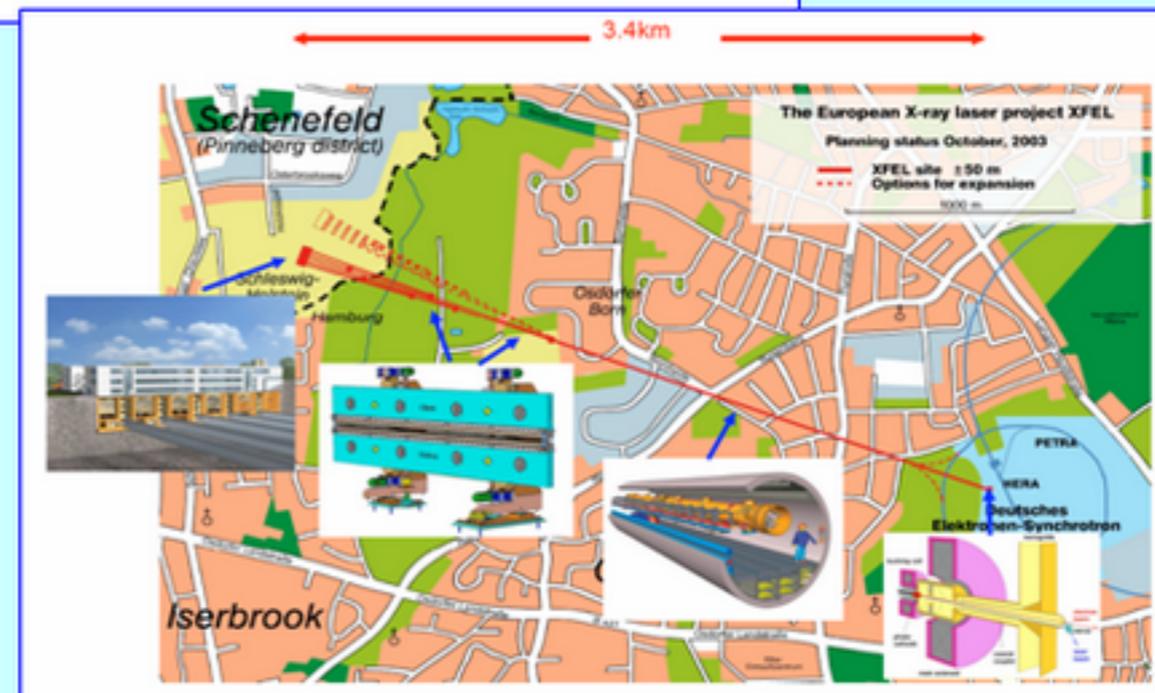
1. Утюг -  $5 \text{ Вт/см}^2$  ;



2. ТВЭЛы на АЭС -  $200 \text{ Вт/см}^2$



3. XFEL -  $3-10 \text{ кВт/см}^2$



## Две задачи:

1. Как импульсы РЛСЭ (XFEL) нагревают кристалл ?

2. Как этот нагрев влияет на дифракцию импульсов ?

(монохроматизация, self-seeding)

Основная  
проблема:



$$I, T, d, \theta_B = f(\mathbf{r}, t)$$

# Простые оценки (для алмаза):

1. Допустимая неоднородность распределения температуры в разных точках кристалла:

$$\Delta T_c = \Delta \theta_B \operatorname{ctg} \theta_B / 2 \alpha_T, \quad \rightarrow \quad \Delta T_c \sim 1-70 \text{ К}$$

где  $\alpha_T$  - линейный коэффициент теплового расширения.

2. Оценка температуры нагрева одним импульсом:

$$\Delta T_1 = \mu Q_0 / (\pi c \rho r_1^2). \quad \rightarrow \quad \Delta T_1 \sim 0.05-2 \text{ К}$$

$\lambda_0 = 0.1 \text{ nm}$ ,  $N = 2.8 \cdot 10^{11}$ ,  $Q_0 = 556 \text{ } \mu\text{J}$ , поглотится доля  $\eta = \mu l / \gamma_0$ ,  
 $\mu = 3.15 \text{ cm}^{-1}$ ,  $l = 50 \text{ } \mu\text{m}$ , геометрия Брэгга, C(400),  $\eta = 0.03$ ,  
 $Q = \eta Q_0 = 15.57 \text{ } \mu\text{J}$ ,  $\rho = 3.52 \text{ г/см}^3$ ,  $z = 500 \text{ m}$ ,  $r_{1w} = 597 \text{ } \mu\text{m}$ ,  
 $c =$  (удельная теплоемкость) =  $510 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{К)}$  при  $300 \text{ К}$ ,

$$\Delta T_1 \approx 0.24 \text{ К}, \quad \rightarrow \quad T_1 = 0.24 \text{ К} \times 2700 = 650 \text{ К} \quad !!!??$$

### 3. Характерное время остывания (время, за которое температура в максимуме снизится в 2 раза):

$$\tau_T = r_1^2 c_p / 4k.$$

где  $k$  - теплопроводность ( $k_{\text{алмаз}}/k_{\text{медь}} \sim 14 - 4$ ) !!

### Типичные значения для алмаза

$$\tau_T \sim 1-700 \text{ мкс}$$

Расстояние между импульсами в пачке  $\Delta t_0 = 0.6 \text{ ms} / 2700 = 0.2 \text{ }\mu\text{s}$ .

Однако  $\tau_T$  много больше интервала времени **0.1 с** между пачками.

Коэффициент линейного расширения  $\alpha_T \cdot 10^6$ , теплоемкость  $c_p$  (Дж·кг<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup>), теплопроводность **алмаза** типа I к (Вт·м<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup>) и время остывания  $\tau_T$  в зависимости от температуры;  $\Delta T_c$  – критическая температура,  **$\Delta T_1$  - температура нагрева под влиянием одного импульса**,  $\rho = 3.52$  г·см<sup>-3</sup>;  $\lambda = 0.1$  нм, отражение (400);  $N = 2.8 \cdot 10^{11}$ ,  $z = 500$  м, размер импульса  $r_p = 800$  мкм.

$T, \text{K}$	100	<b>200</b>	<b>300</b>	400	600
$\alpha_T, \text{K}^{-1}$	0.05	<b>0.45</b>	<b>1.0</b>	1.80	3.09
$c_p$	29	<b>214</b>	<b>514</b>	854	1342
к	3050	<b>1400</b>	<b>900</b>	650	400
$\tau_T, \text{мкс}$	1.9	<b>31.0</b>	<b>115.8</b>	266.4	680.2
$\Delta T_c, \text{K}$	75.4	<b>8.4</b>	<b>3.8</b>	2.1	1.2
$\Delta T_1, \text{K}$	2.4	<b>0.32</b>	<b>0.13</b>	0.08	0.05

С увеличением температуры кристалла:

**Температура нагрева импульсом:**

$$\Delta T_1 = \mu Q_0 / (\pi c \rho r_1^2) \quad \downarrow \quad \text{хорошо}$$

**Время остывания:**

$$\tau_T = r_1^2 c \rho / 4k \quad \uparrow \quad \text{плохо}$$

**Критическая температура:**

$$\Delta T_c = \Delta \theta_B \operatorname{ctg} \theta_B / 2 \alpha_T \quad \downarrow \quad \text{плохо}$$

Расстояние между импульсами в пачке  $\Delta t_0 = 0.6 \text{ ms} / 2700 = \mathbf{0.2 \mu s}$ .

$$\tau_T \gg \Delta t_{\text{pulse}}$$

# Итог такой:

Тепловые параметры - линейное расширение, теплоемкость и теплопроводность ведут себя “противоположным” образом (пример – короткое одеяло).....

Тем не менее, малые времена теплообмена  $\tau_T$  и большие значения критической температуры  $\Delta T_c$  при низких температурах свидетельствуют о необходимости использования низкой начальной температуры

# Уравнение теплопроводности

$$c_p \rho (\partial T / \partial t) = \operatorname{div}(\kappa \cdot \operatorname{grad} T) - s(T - T_s) + F,$$

где  $\kappa$  - **коэффициент теплопроводности**,  $s$  - коэффициент теплообмена,  $F(x, y, z, t)$  - **плотность тепловых источников**.

$$F(x, y, t) = \frac{\mu Q_p}{\pi r_1^2} g(x) g(y) f(t)$$

$$g(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{r_x^2}\right) \quad g(y) = \exp\left(-\frac{y^2}{r_y^2}\right)$$

$$f(t) = (1 / \pi^{1/2} \tau_0) \sum_{j=1}^p \exp[-(t - t_j)^2 / \tau_0^2]$$

$$T(x, y, t) = \Delta T_1 \sum_{j=1}^p \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} Q_{mn}(t - t_j) S_{mn}(x, y)$$

$$Q_{mn}(t - t_j) = \exp[-a^2 (q_m^2 + q_n^2)(t - t_j)]$$

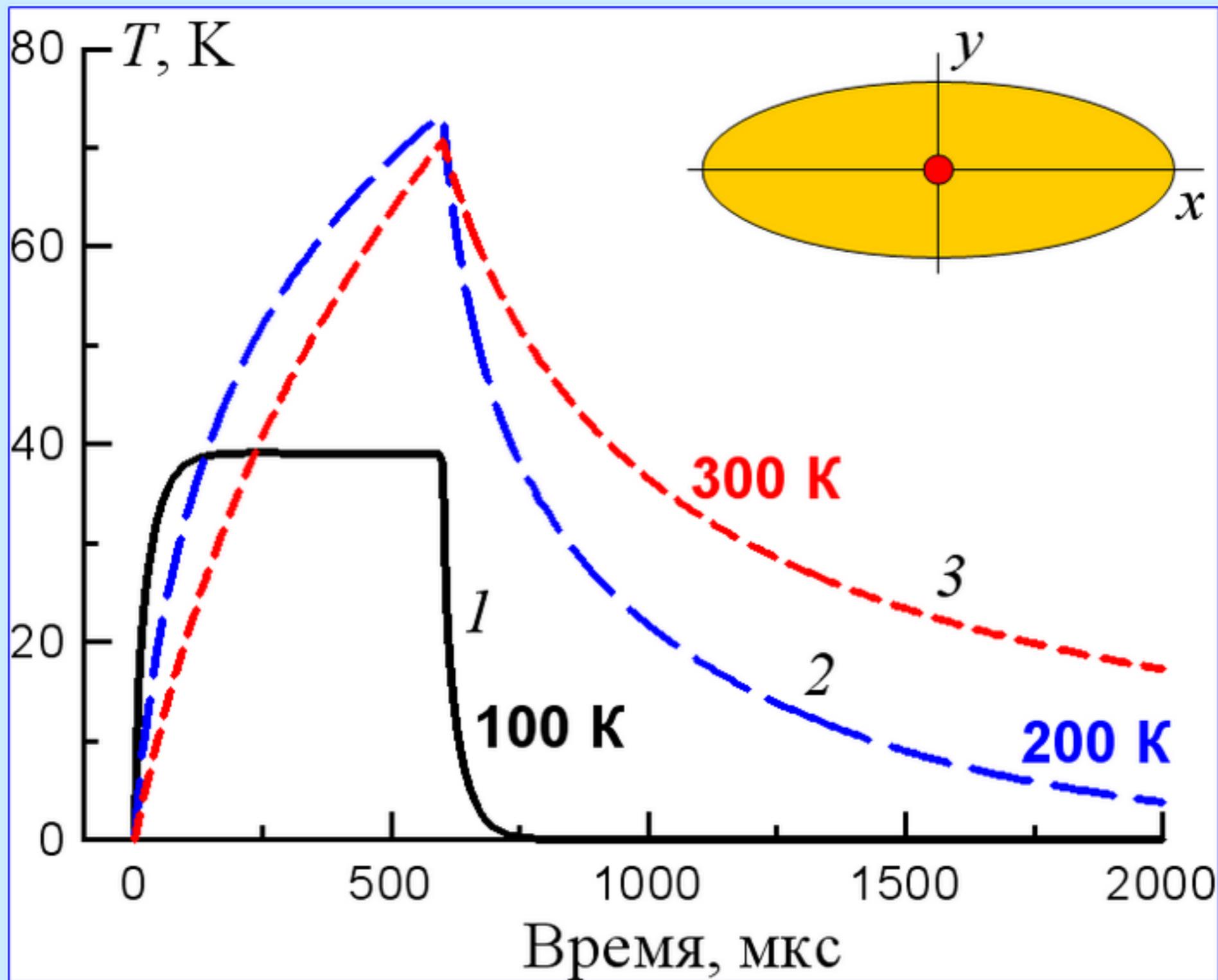
$$S_{mn}(x, y) = g_{xm} g_{yn} \cos(q_m x) \cos(q_n y)$$

$$g_{im} = (2/L) \int_{-L/2}^{L/2} g_i(\xi) \cos(q_m \xi) d\xi$$

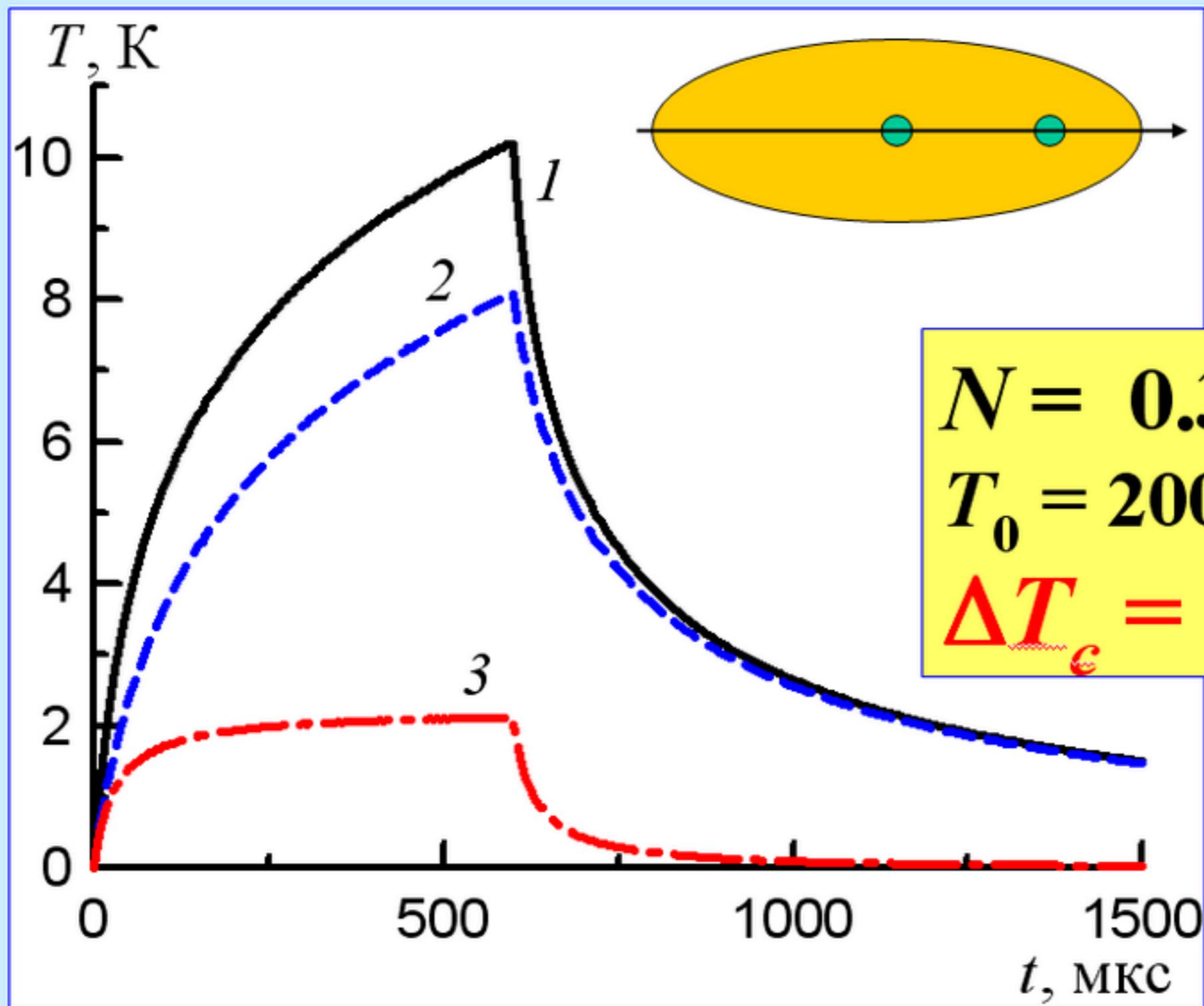
Начальное и граничные условия:  $T(x, y, 0) = T_0$ ,  $T(\pm L/2, \pm L/2, 0) = T_0$ .

Здесь  $\Delta T_1 = \mu Q_p / (\pi c_p \rho r_1^2)$  - температура нагрева в точке  $x, y = 0$  под действием одного импульса,  $a^2 = \kappa / c_p \rho$  - коэффициент температуропроводности,  $q_k = \pi(2k - 1)/L$ ,  $k = m, n$ ,  $i = x, y$ .

# Зависимость температуры кристалла от времени

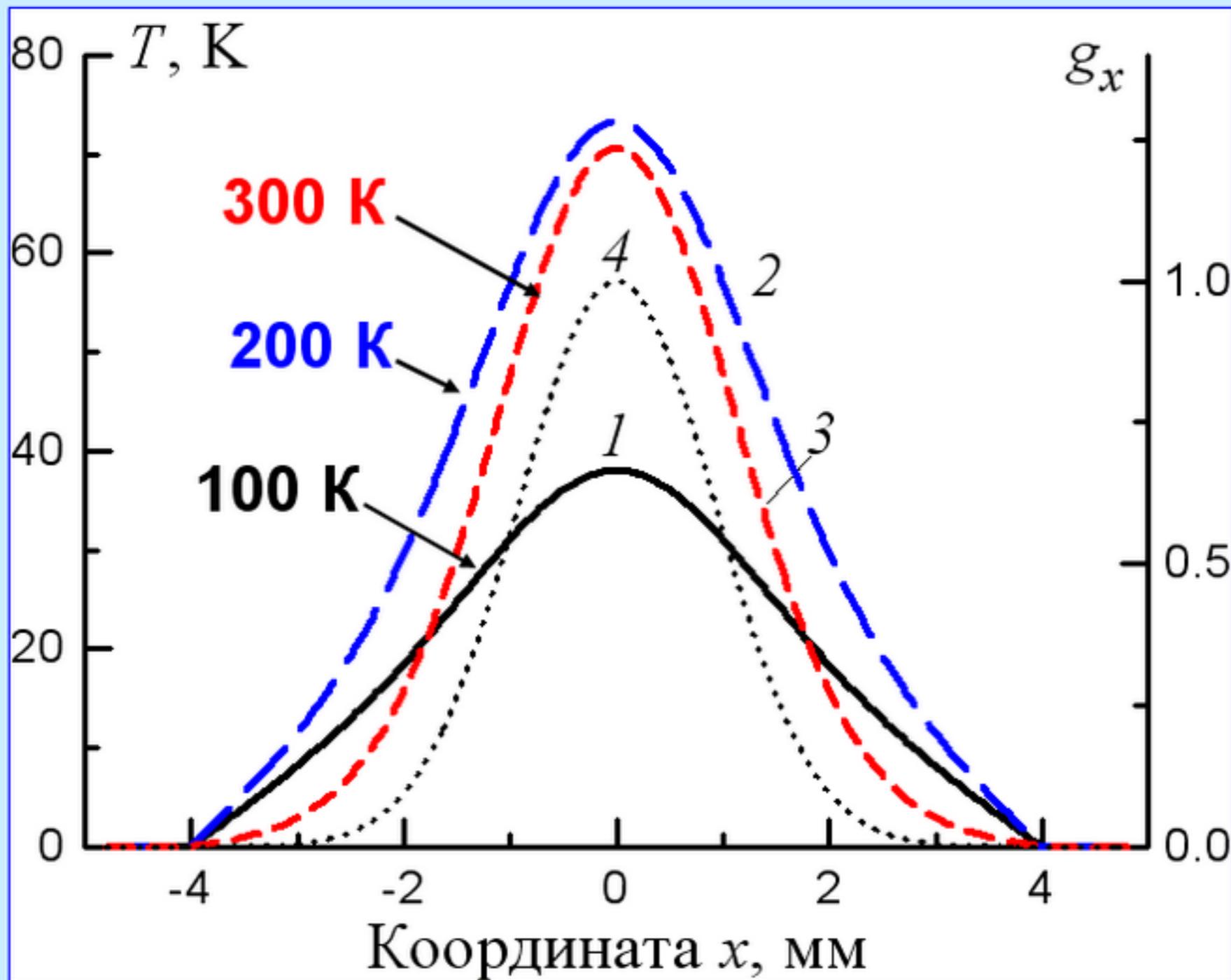


**В точке  $x = y = 0$  при  $T_0 = 100$  К (1), 200 К (2), 300 К (3);  
 $N = 2.8 \cdot 10^{11}$  кв/имп,  $r_p = 1.2$  мм.**



Зависимость температуры в точках  $x = 0$  (1) и  $x = x_1$  (2); разность температур  $\Delta T(t)$  (3). Алмаз типа Ца,  $N = 0.3 \cdot 10^{11}$ ,  $Q_p = 60 \text{ мкДж}$ ,  $T_0 = 200 \text{ K}$ ,  $c_p = 214 \text{ Дж} \cdot \text{кг}^{-1} \cdot \text{K}$ ,  $\kappa = 4000 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ,  $r_p = 800 \text{ мкм}$ ,  $\tau_T = 10.8 \text{ мкс}$ ,  $\Delta T_c = 8.4 \text{ K}$ ,  $\Delta T_1 = 0.034 \text{ K}$ ,  $T_{\text{max}} = 10.1 \text{ K}$ , разность температур  $\Delta T(t)$  выходит на **плато с  $\Delta T \approx 2 \text{ K}$** .

# Пространственное распределение температуры $T(x, 0, 600 \text{ мкс})$



1. При  $T_0 = 100 \text{ К}$   
 $T_{\text{max}} = 38 \text{ К} < \Delta T_{\epsilon} = 75 \text{ К},$
2. При  $T_0 = 300 \text{ К}$   
ситуация обратная:  
 $T_{\text{max}} = 71 \text{ К} \gg \Delta T_{\epsilon} = 4 \text{ К}.$

$$N = 0.3 \cdot 10^{11} \text{ фот/ИМП}$$

Пространственное распределение температуры  $T(x, 0, 600 \text{ мкс})$  при  $T_0 = 100 \text{ К}$  (1),  $200 \text{ К}$  (2) и  $300 \text{ К}$  (3); 4 – профиль интенсивности падающего импульса  $g_x$  (правая шкала)

# Влияние температуры $T(x, y, t)$ на интенсивность отраженных и проходящих импульсов

Условие “сильной” дифракции:  $|\alpha| \leq 2|\chi_h|$

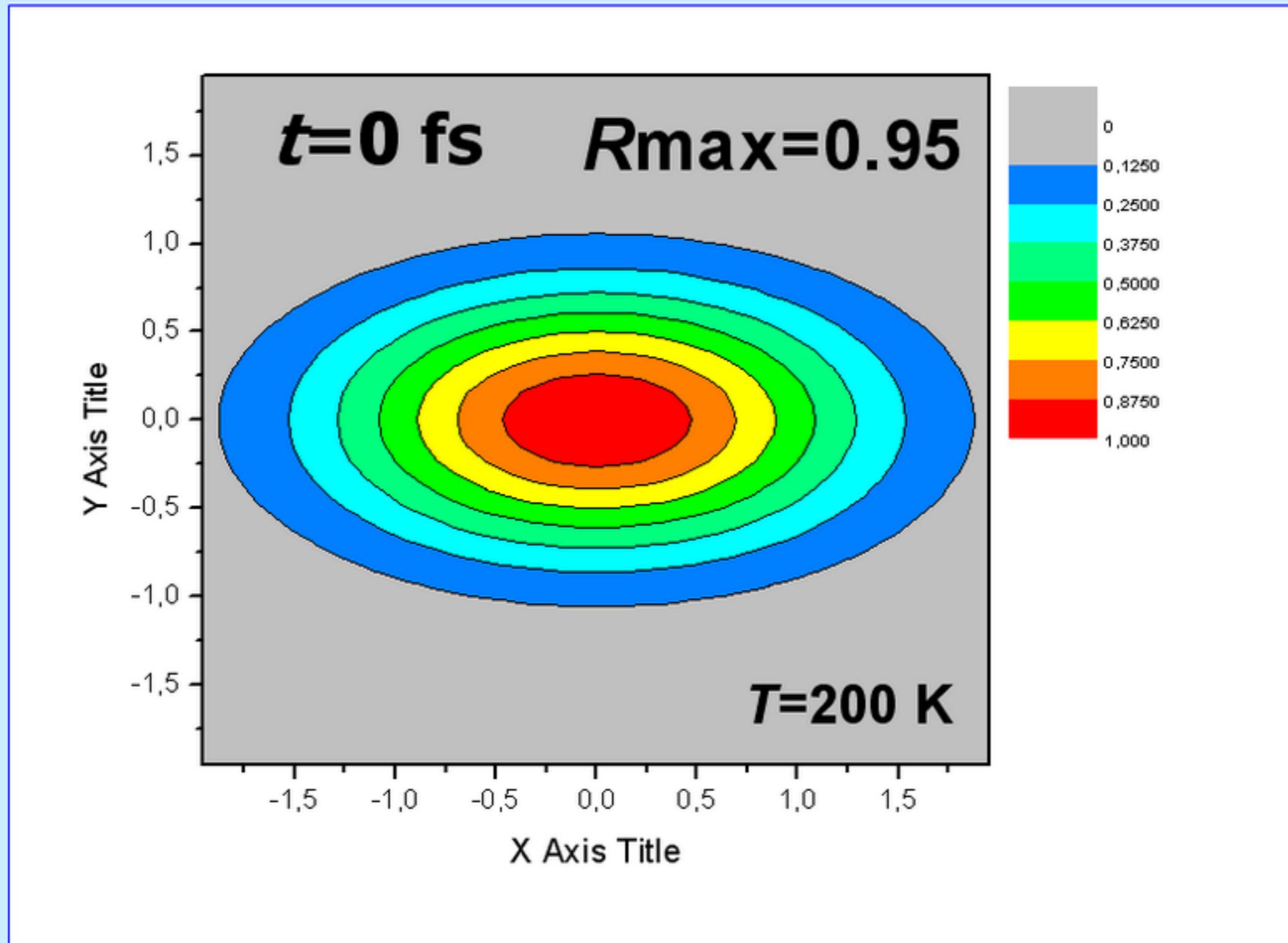
$$\alpha = [k^2 - (\vec{k} + \vec{h})^2] / k^2$$

$$\begin{aligned} \alpha(\Delta\theta, \Omega, T(x, y), q_x) = \\ = 2 \sin 2\theta_B [\Delta\theta + (\Omega / \omega_0 + \alpha_T T) \operatorname{tg} \theta_B - q_x / k_0] \end{aligned}$$

Интенсивность отраженного ( $C = R$ ) и прошедшего ( $C = T$ ) импульсов:

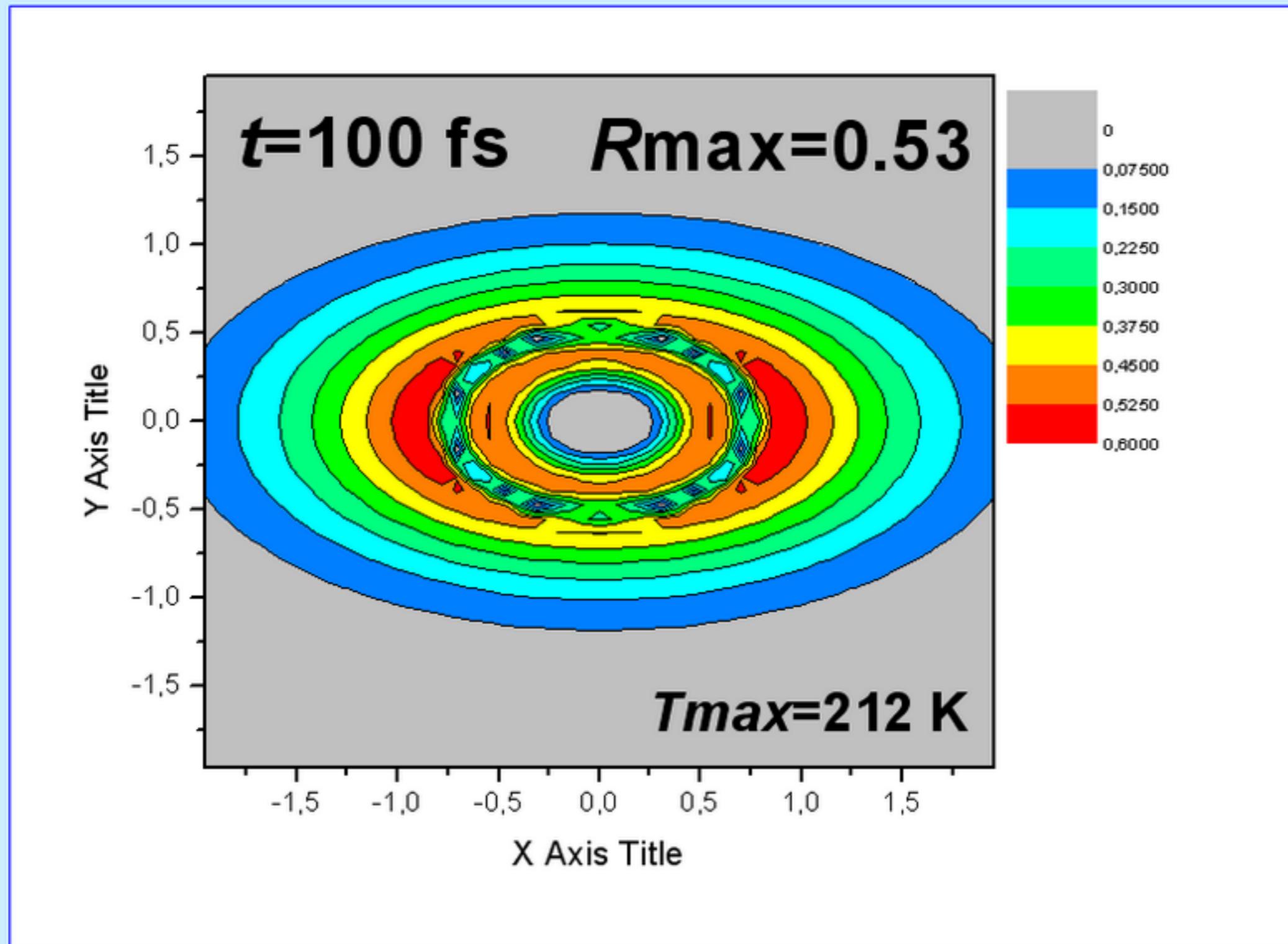
$$\begin{aligned} I_C(\vec{r}, t) = I_0(\vec{r}) \iint C(\alpha) C^*(\alpha') < \underline{A_s(\Omega) A_s^*(\Omega')} > \times \\ \times \exp[-i(\Omega - \Omega')t] d\Omega d\Omega' \end{aligned}$$

# Карта распределения интенсивности $R$ -импульсов $I_R(x, y, t, \Omega = 0)$ в различные моменты времени $t$



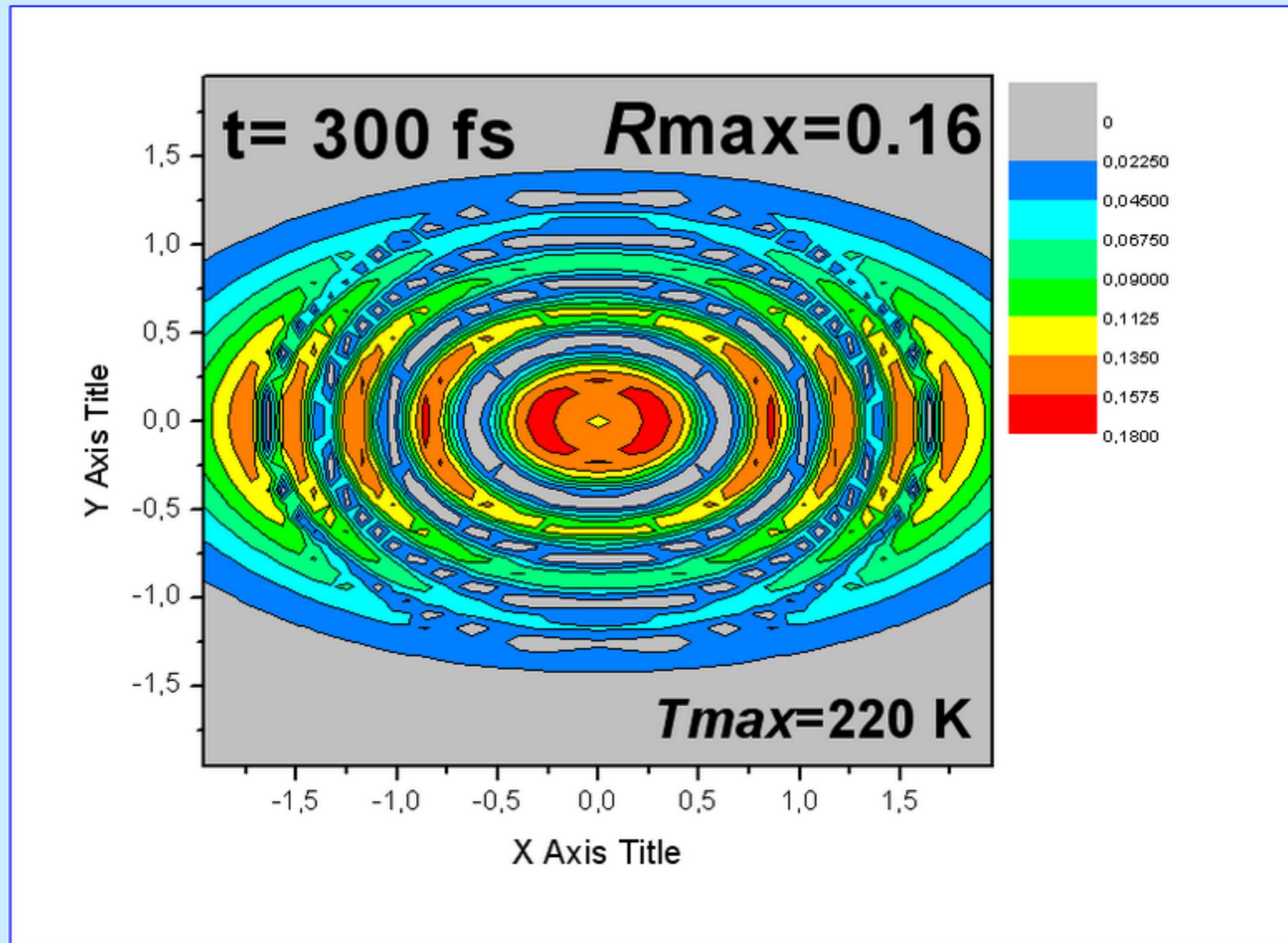
$N = 10^{11}$  фотон/имп,  $T = 200$  К, алмаз типа Па

# Карта распределения интенсивности $R$ -импульсов $I_R(x, y, t, \Omega = 0)$ в различные моменты времени $t$



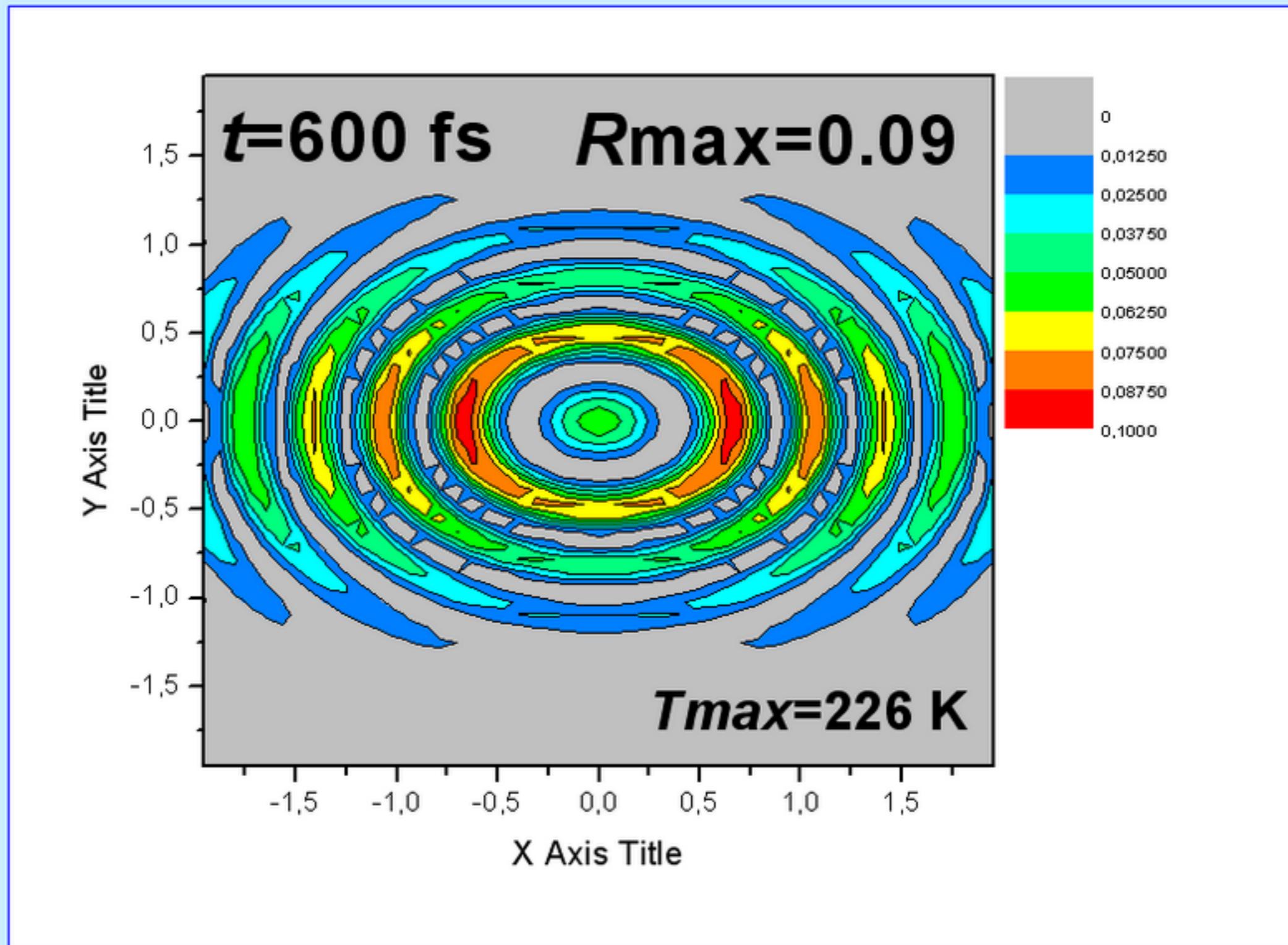
$N = 10^{11}$  фотон/имп,  $T = 200$  К, алмаз типа Па

# Карта распределения интенсивности $R$ -импульсов $I_R(x, y, t, \Omega = 0)$ в различные моменты времени $t$



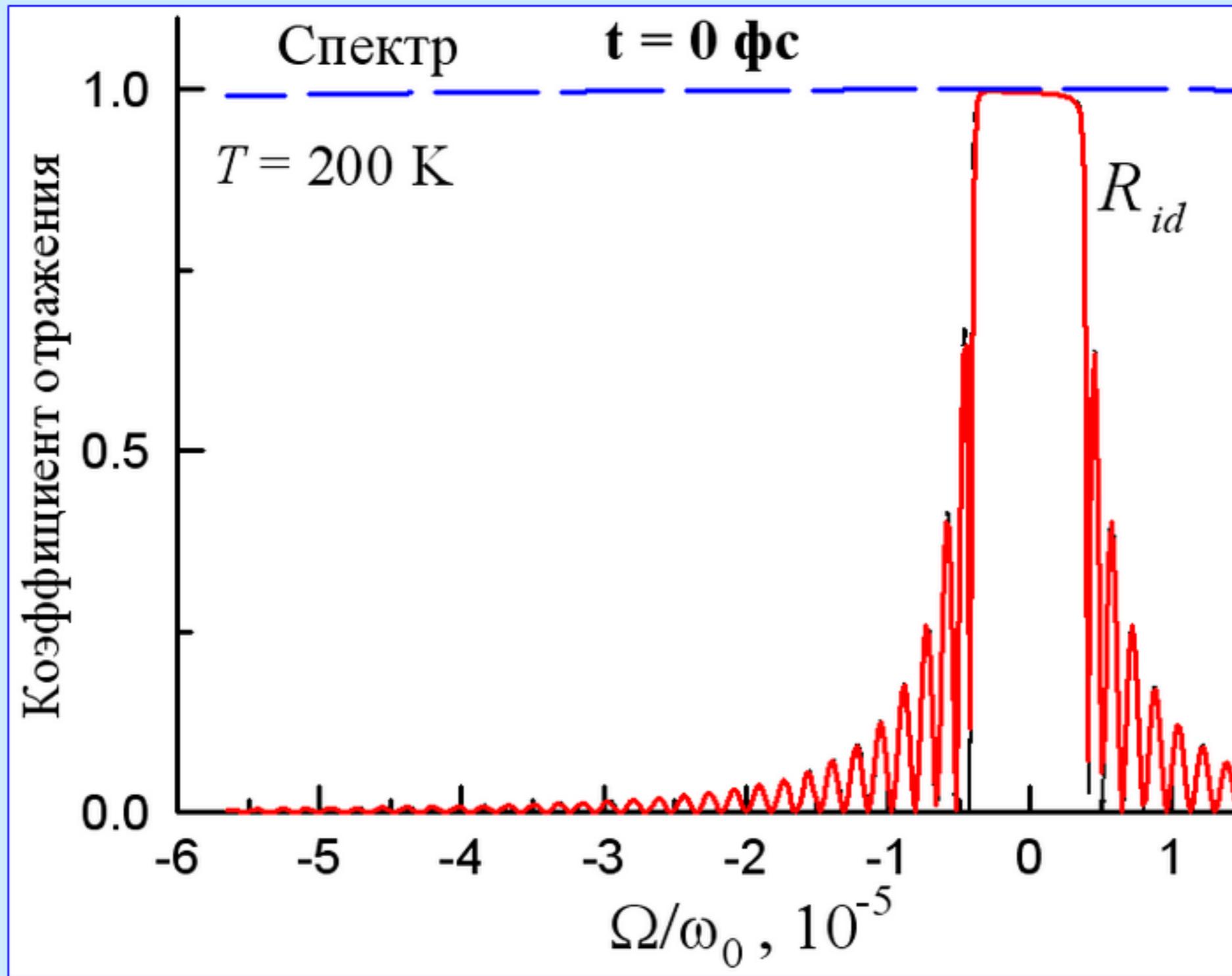
$N = 10^{11}$  фотон/имп,  $T = 200$  К, алмаз типа Па

# Карта распределения интенсивности $R$ -импульсов $I_R(x, y, t, \Omega = 0)$ в различные моменты времени $t$



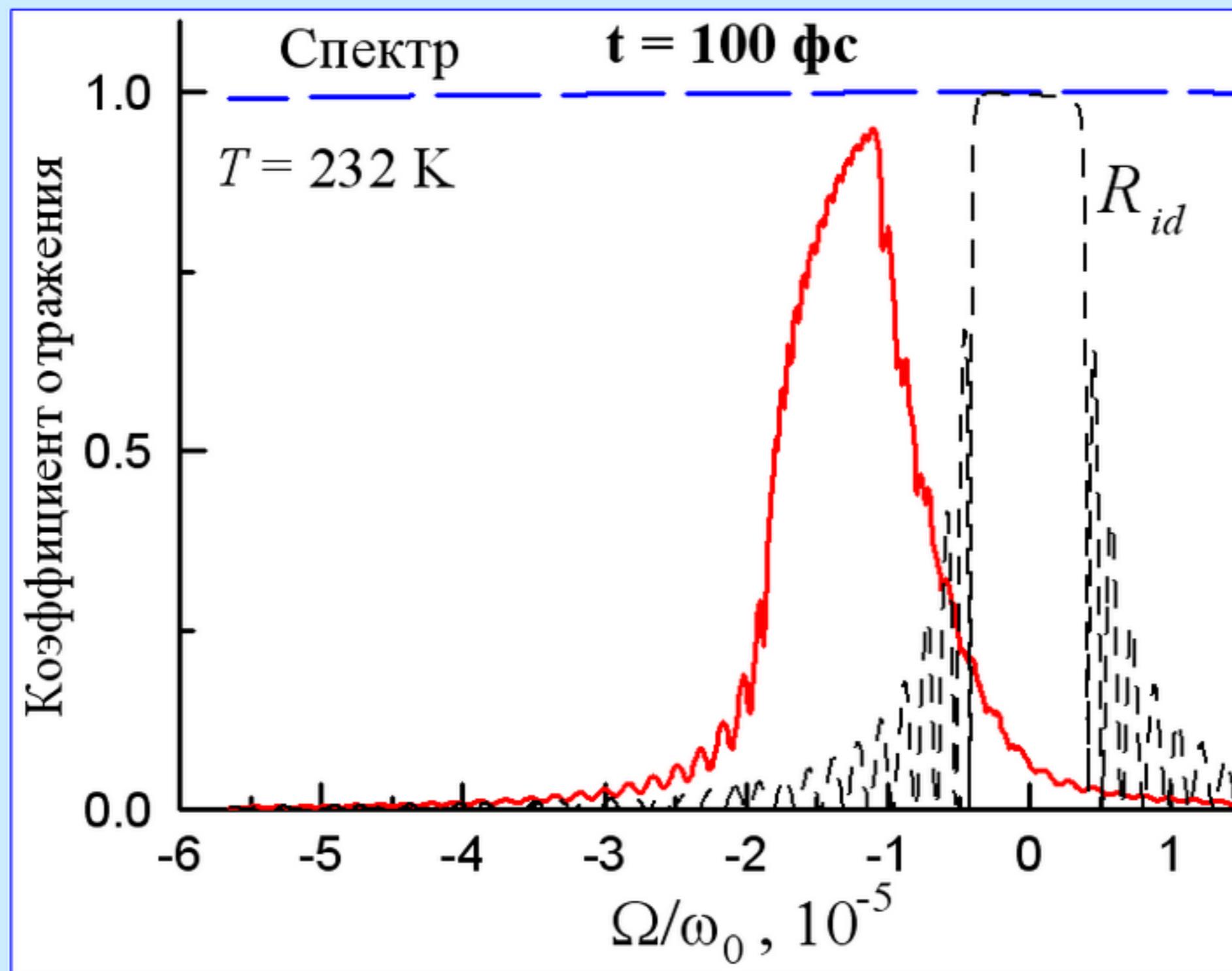
$N = 10^{11}$  фотон/имп,  $T = 200$  К, алмаз типа IIa

# Спектральный коэффициент отражения в различные моменты времени



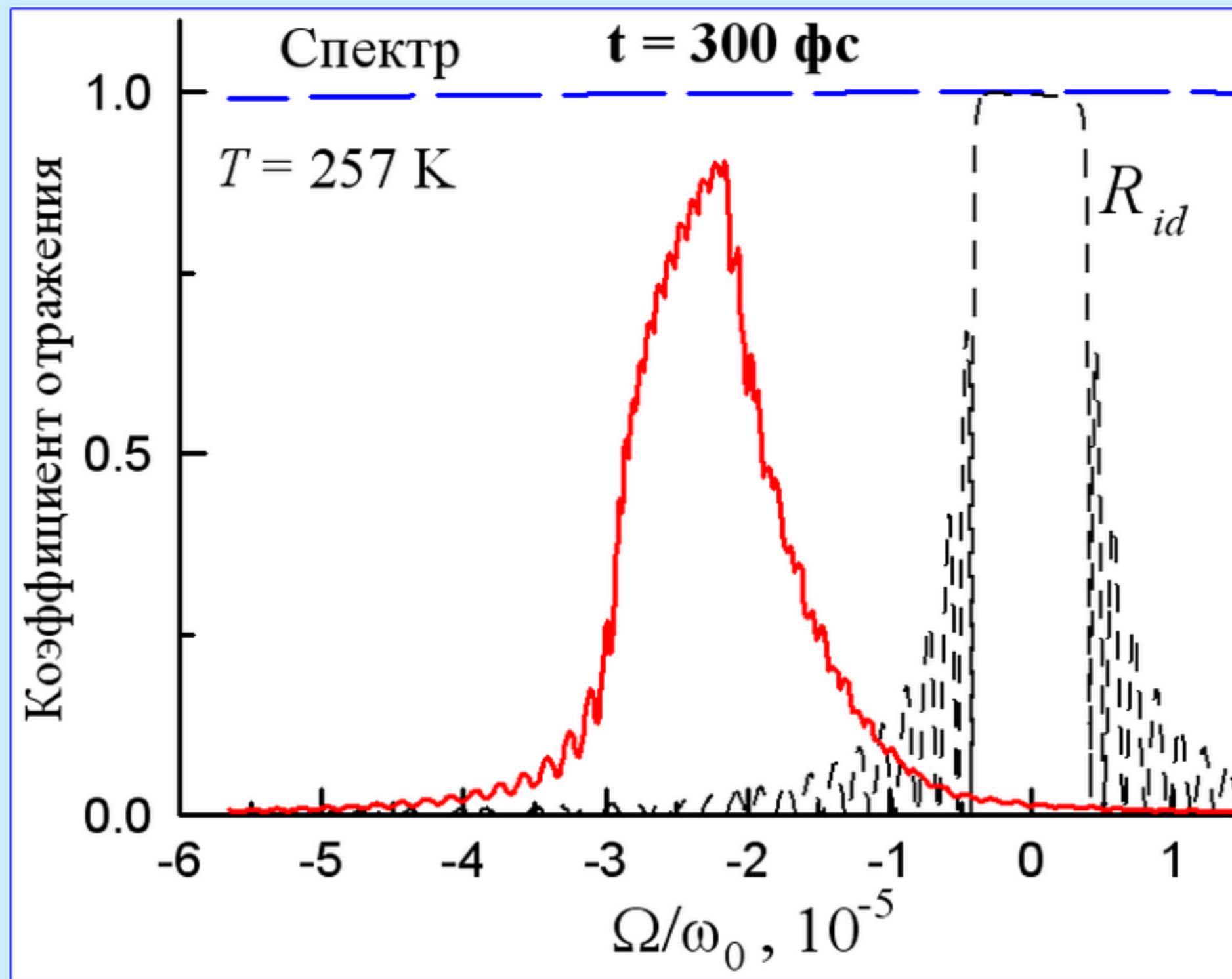
$$N = 2.8 \cdot 10^{11}, T_0 = 200 \text{ К}, \Delta T_c = 8.4 \text{ К.}$$

# Спектральный коэффициент отражения в различные моменты времени



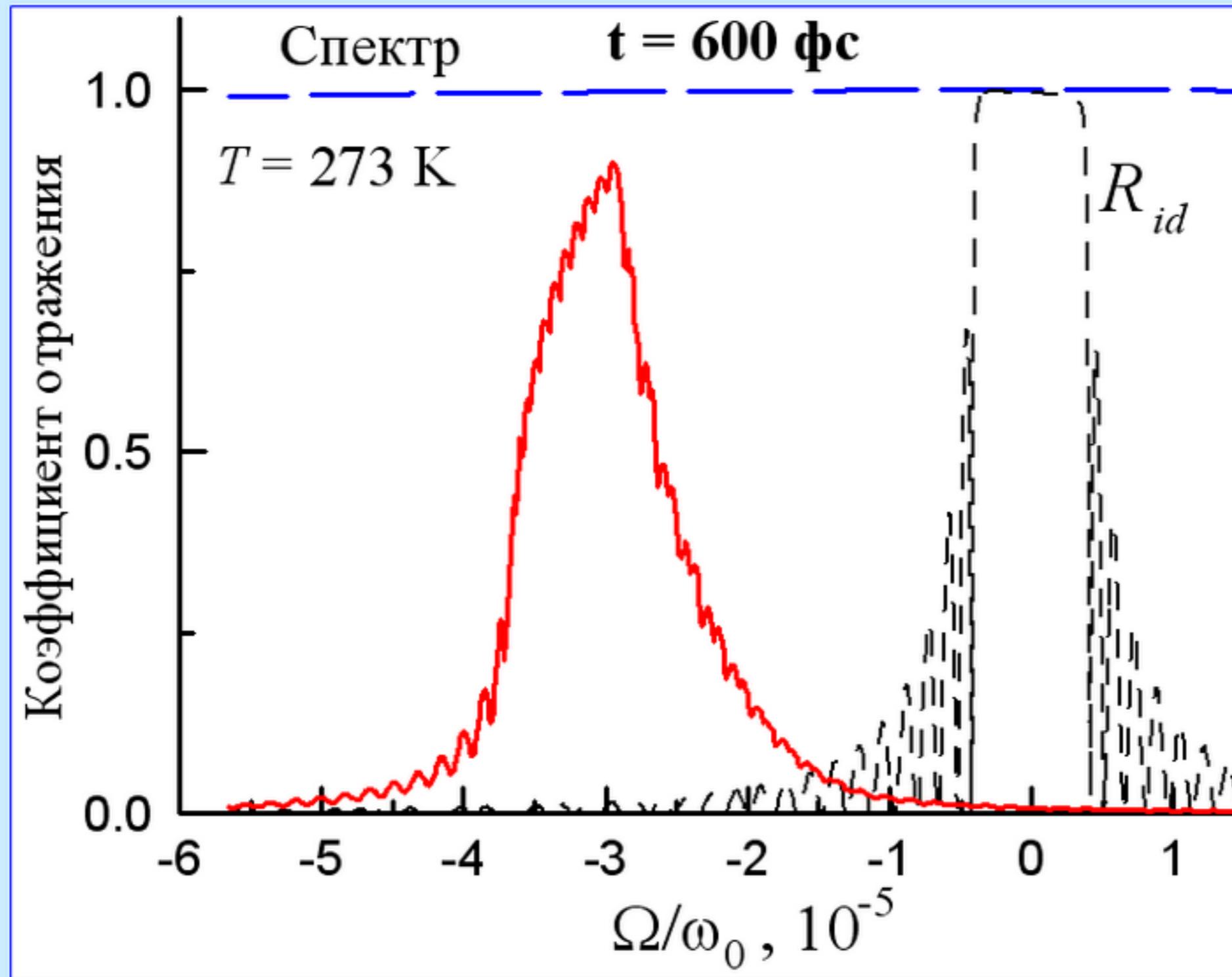
$$N = 2.8 \cdot 10^{11}, T_0 = 200 \text{ К}, \Delta T_c = 8.4 \text{ К.}$$

# Спектральный коэффициент отражения в различные моменты времени



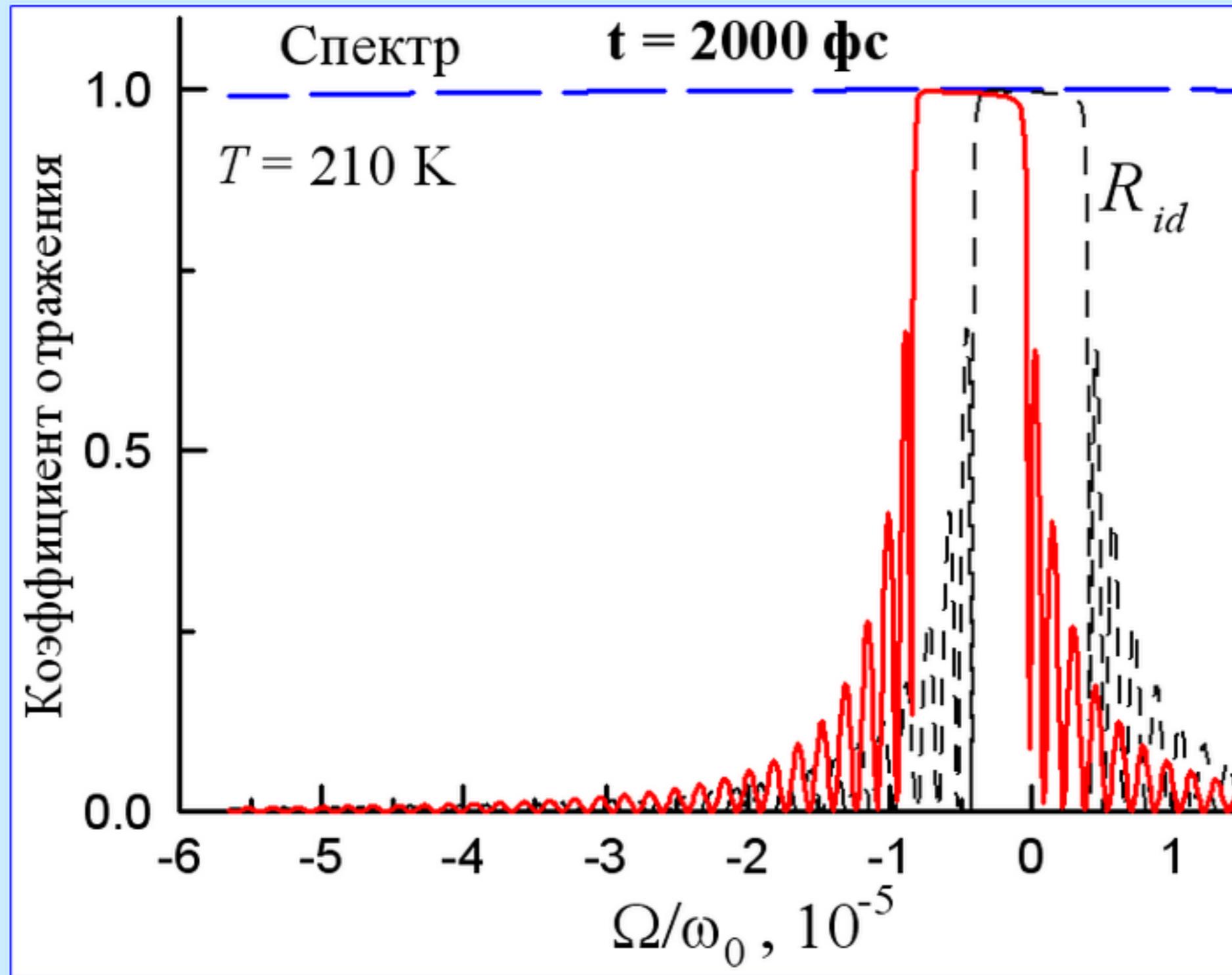
$$N = 2.8 \cdot 10^{11}, T_0 = 200 \text{ К}, \Delta T_c = 8.4 \text{ К.}$$

# Спектральный коэффициент отражения в различные моменты времени



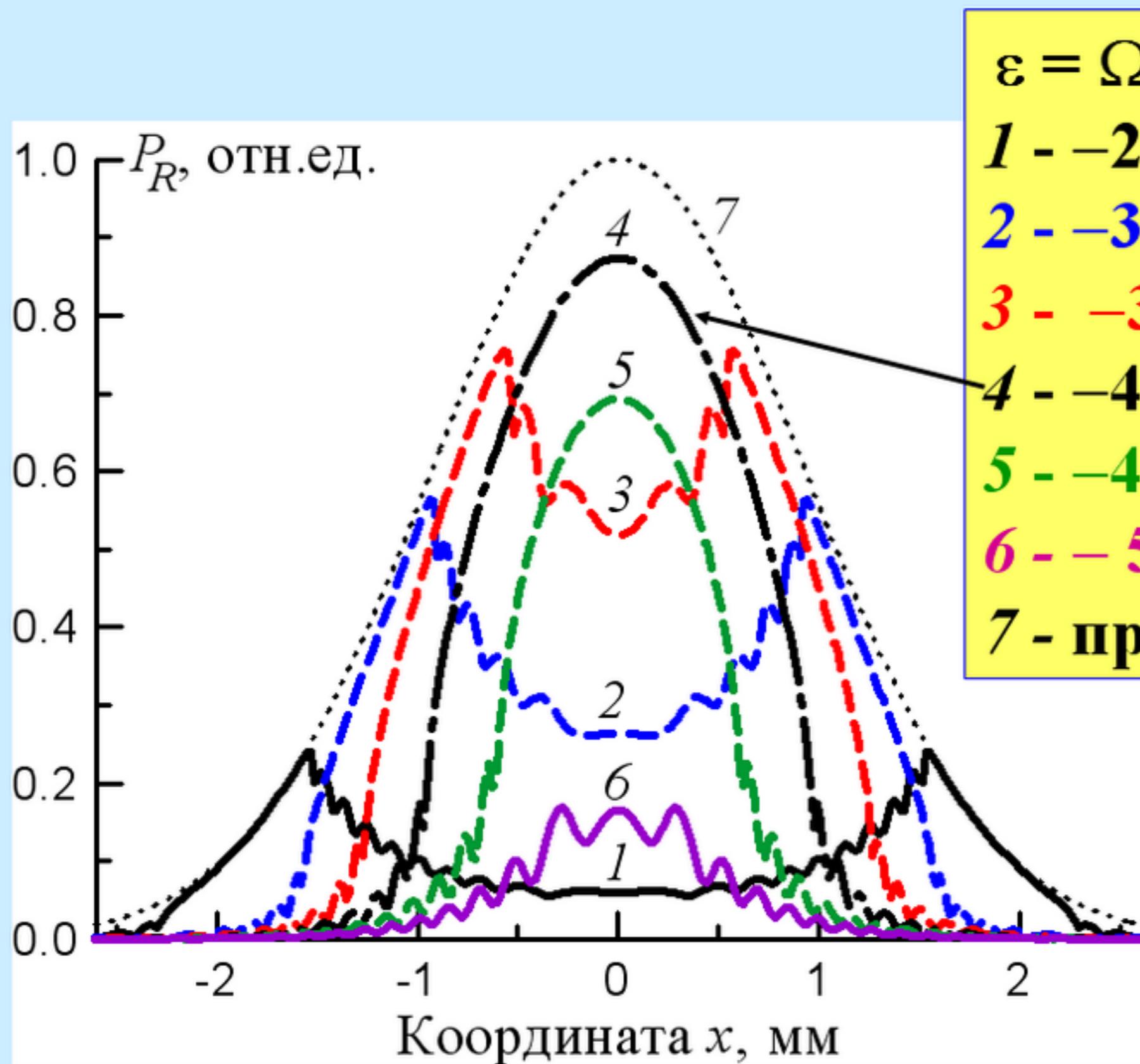
$$N = 2.8 \cdot 10^{11}, T_0 = 200 \text{ К}, \Delta T_c = 8.4 \text{ К.}$$

# Спектральный коэффициент отражения в различные моменты времени



$$N = 2.8 \cdot 10^{11}, T_0 = 200 \text{ К}, \Delta T_c = 8.4 \text{ К.}$$

# Интегральные коэффициенты отражения $P_R(x)$



$\epsilon = \Omega / \Delta\Omega_B$ :

1 - -2,

2 - -3,

3 - -3.5,

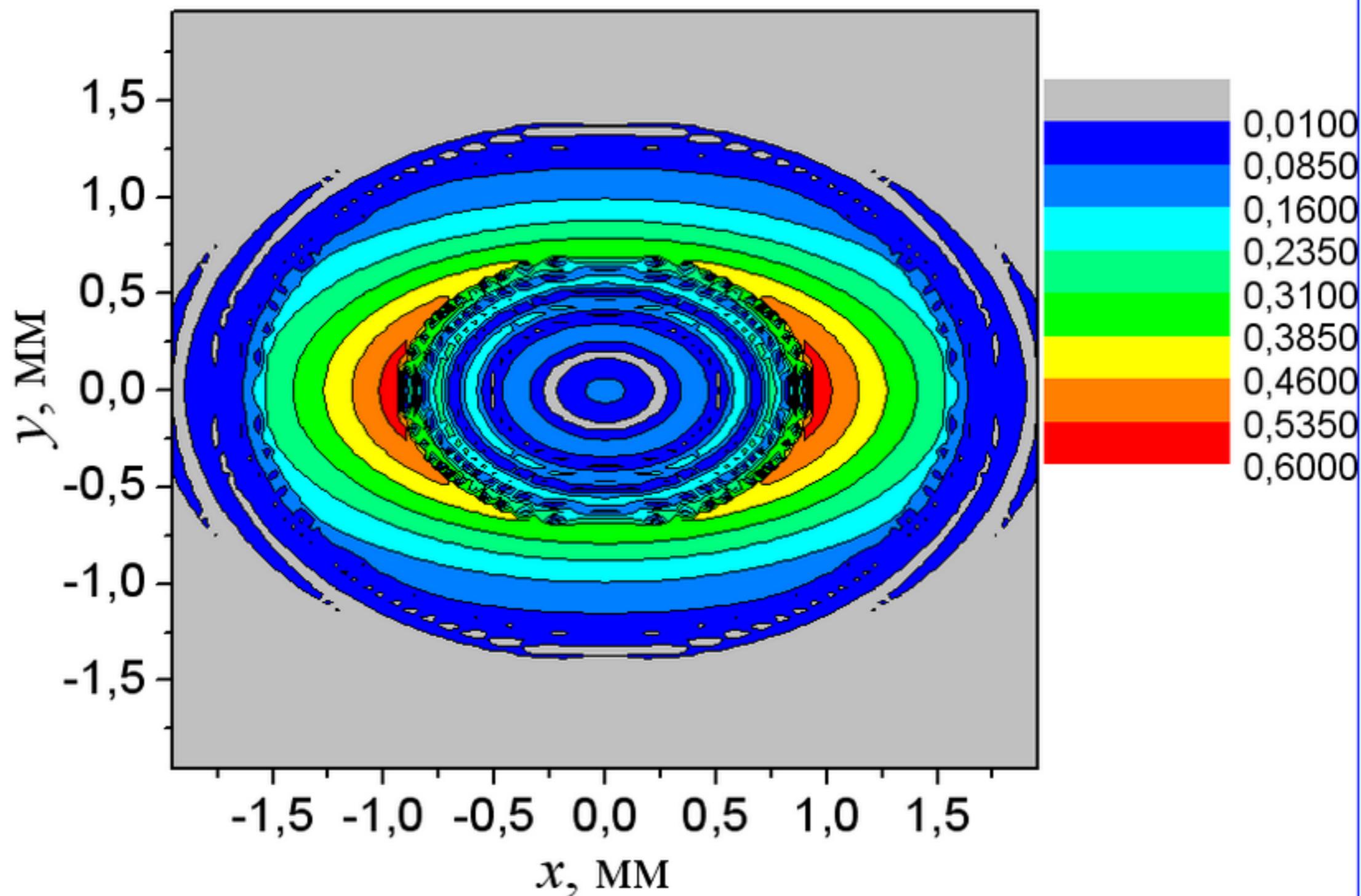
4 - -4,

5 - -4.5

6 - -5

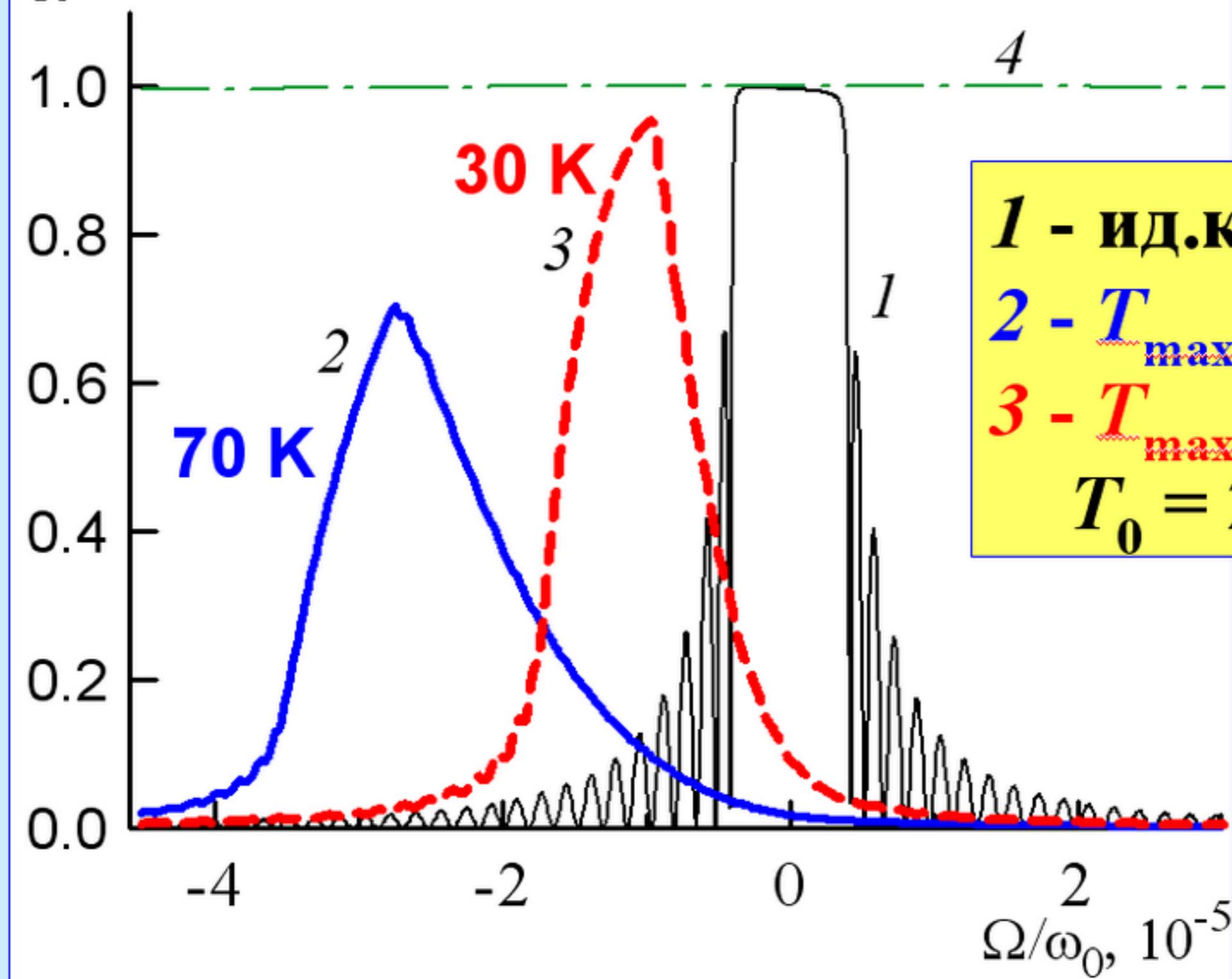
7 - профиль  $I_0(x)$

$T_0 = 200$  К,  
 $t = 600$  мкс



**Карта распределения интенсивности отражения  $I_R(x, y)$  в области спектра  $\varepsilon = -3$  в конце падения пачки импульсов ( $t = 600$  мкс).**

$P_R$ , отн. ед.

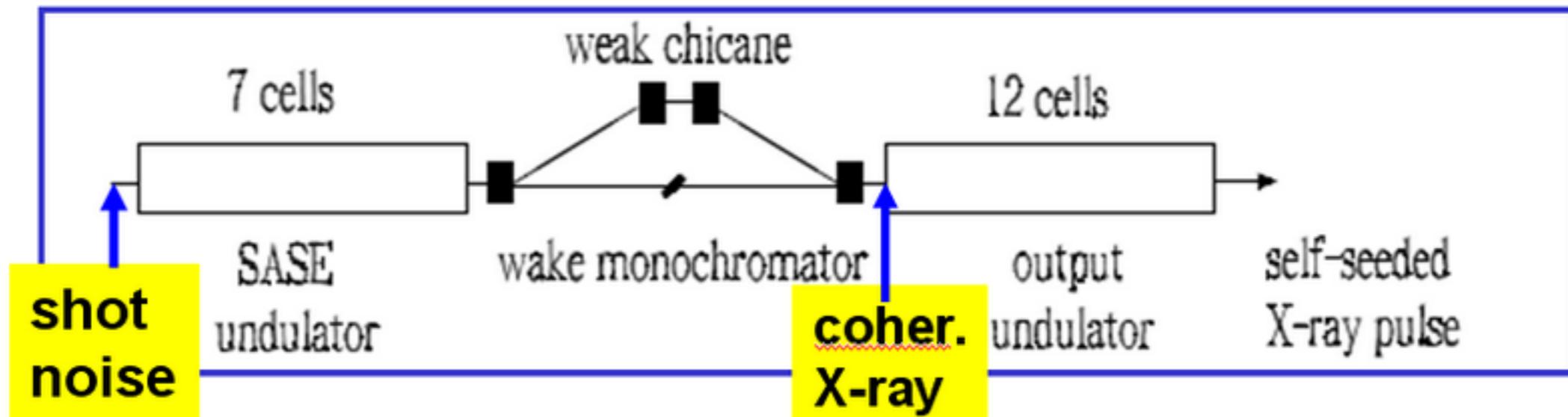


**1 - ид.кристалл,**  
**2 -  $T_{max} = 70$  К,**  
**3 -  $T_{max} = 30$  К,**  
 **$T_0 = 200$  К.**

Интегральные спектральные коэффициенты отражения  $P_R(\Omega)$  от идеального кристалла (1) и от алмаза типа Па с  $T_{max} = 70$  К (2) и  $T_{max} = 30$  К (3); 4 – спектр падающих импульсов  $G(\Omega)$ ;  $T_0 = 200$  К.

# Self-seeding scheme with wake monochromator for narrow-bandwidth X-ray FELs

[1] G. Geloni, V. Kocharyan, E. Saldin, DESY 10-053 (2010)

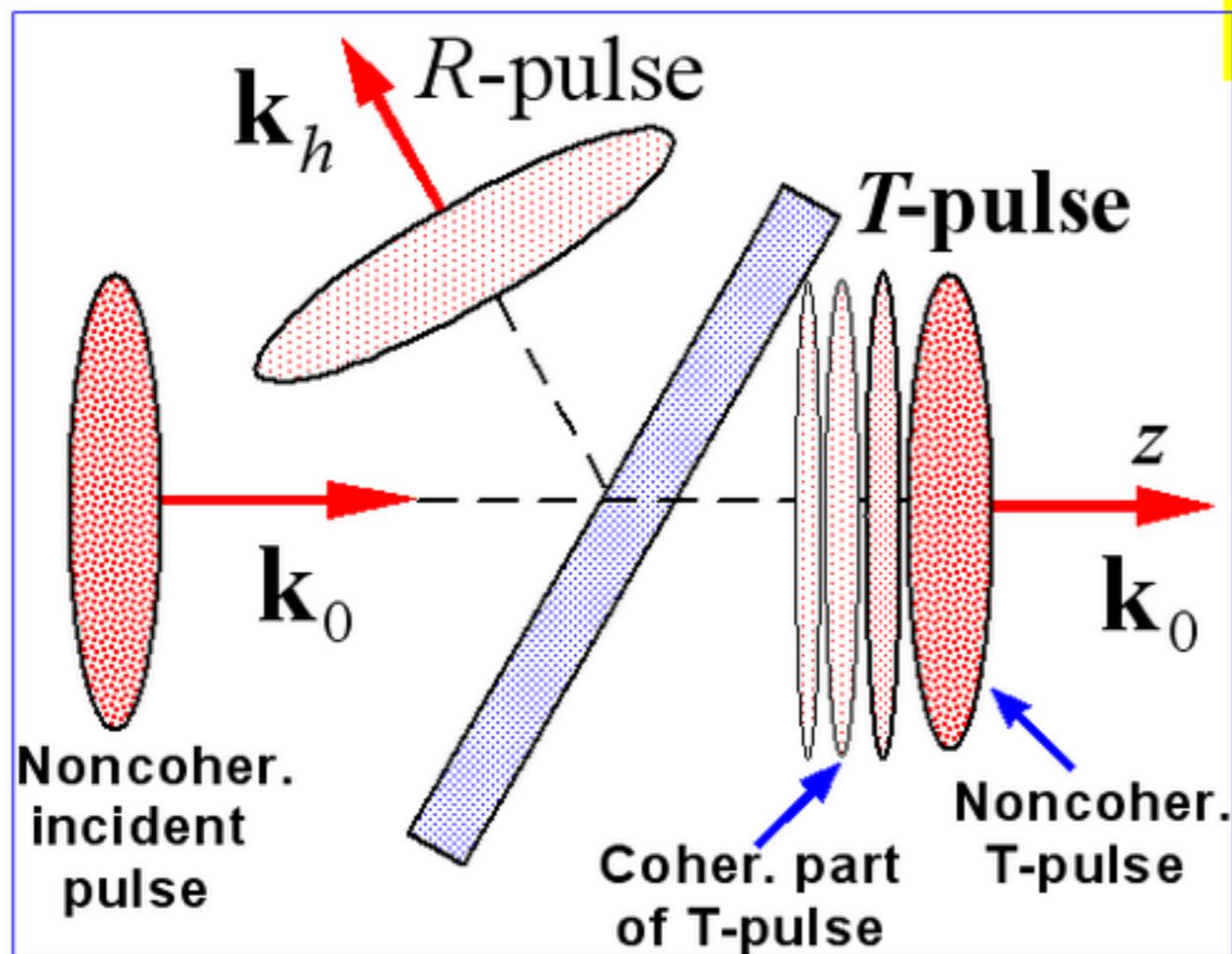


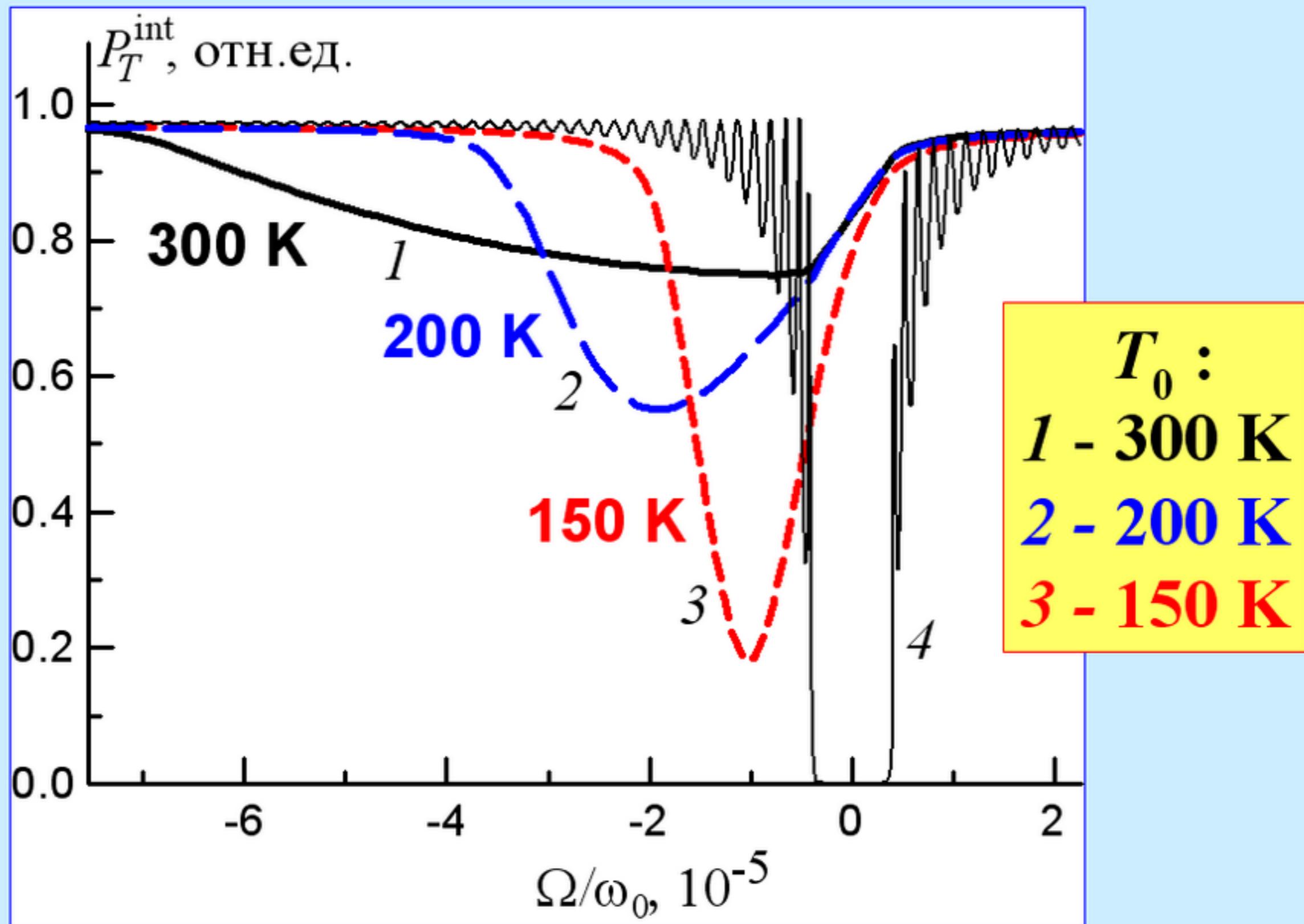
shot noise

coher. X-ray signal

**Bandwidth down to  $10^{-5}$**

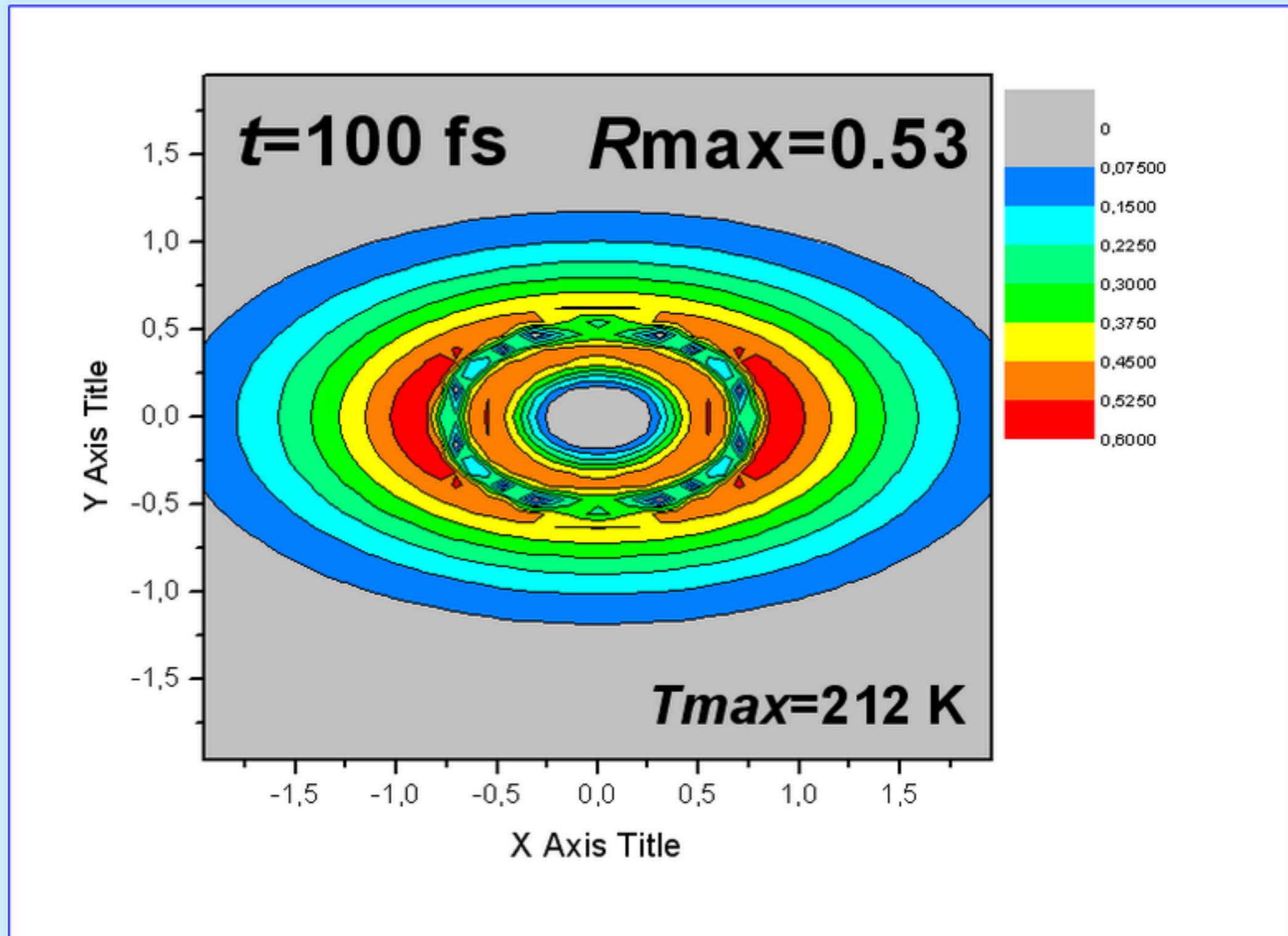
Weak chikane operates as a tunable delay line.





3D-интегральные кривые дифракционного прохождения при начальных температурах кристалла  $T_0 = 300 \text{ K}$  (1),  $200 \text{ K}$  (2) и  $150 \text{ K}$  (3); 4 – кривая прохождения для идеального кристалла.

# Карта распределения интенсивности $R$ -импульсов $I_R(x, y, t, \Omega = 0)$ в различные моменты времени $t$



$N = 10^{11}$  фотон/имп,  $T = 200$  К, алмаз типа Па

## Основные результаты и выводы:

1. В рамках двумерного уравнения теплопроводности с распределенными источниками рассчитаны распределения температуры  $T(x, y, t)$  под действием импульсов РЛСЭ.
2. В случае импульсов большой и средней мощности температуры разогрева достигают 100-300 К, однако основной проблемой является большой градиент температуры, превышающий критические значения  $T_c \sim 1-10$  К.
3. Для импульсов малой мощности ( $N \sim 10^{10}$  ф/имп) условия дифракции выполняются при расстояниях  $z \sim 800$  м.
4. Желательно “работать” при начальной температуре  $T_0 \sim 100-200$  К с оптимальной скоростью отвода тепла.
5. Необходимо рассмотрение задачи с учетом температурной и временной зависимости всех теплофизических параметров.

# Благодарности

- 1. Российский Фонд Фундаментальных Исследований, проекты № 10-02-00768, 12-02-00924;**
- 2. The German Federal Ministry of Education and Research (BMBWF), project no. 05K10CHG.**

**Спасибо за внимание**