

Extrém nagy energiájú THz-es impulzusokon alapuló elektrongyorsító elrendezés numerikus vizsgálata

Készítette:

Sarkadi Balázs Róbert
PTE TTK Fizikus MSc

Témavezető:

Dr. Turnár Szabolcs Tamás

Pécs
2024

Tartalomjegyzék

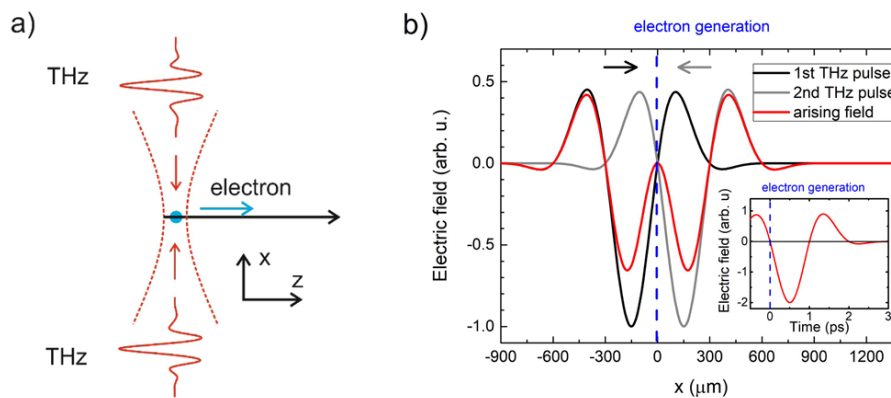
I. Bevezetés	3
II. Eszközök és módszerek ismertetése	6
II.1 Modell bemutatása	6
II.2 Gázfűvóka tervezése és vizsgálata	7
II.3 Ionizáció vizsgálata.....	9
II.4 Elektrongyorsítás	15
III. Eredmények.....	17
III.1 Kriptongázfűvóka	17
III.2 Ionizáció	24
III.3 Elektrongyorsítás	26
IV. Összefoglaló.....	29
Köszönetnyilvánítás	31
Irodalom jegyzék	32

I. Bevezetés

A terahertzes (THz) sugárzás előállítása és alkalmazása ugyan nem régóta kutatott területek, de nagy fejlődésen estek át az elmúlt évtizedekben. A THz-es sugárzás az elektromágneses spektrumban a mikrohullám és az infravörös tartomány között helyezkedik el. Frekvenciája jellemzően 0,1 – 30 THz. Ehhez a tartományhoz 3 - 0,01 mm-es hullámhossz társítható. A THz-es sugárzás kisenergiájú, tehát nem ionizáló sugárzás. Ez azt jelenti, hogy az élő szövetekre nem jelent veszélyt. A PTE TTK Fizikai Intézetének egyik fő kutatási területe napjainkban a THz-es impulzusok generálása és azok alkalmazása, ezen tématerületen belül is a THz-es impulzusokon alapuló részecskegyorsítás (elektron-[1, 2], valamint protongyorsítás[3]) a fő csapásirány. 2002-ben Dr. Hebling János, egyetemi tanár, kollégáival kidolgozott egy olyan eljárást[4], mely megnyitotta a kaput a nagy energiájú THz-es impulzusok előállítása felé[5]. Ezzel együtt pedig az alkalmazási területek száma is kibővíthetett. 2009-ben Dr. Hebling János előrevetítette a THz-es impulzusok egy újabb jövőbeli lehetséges felhasználási területét, a részecskegyorsítást[6]. A 2000-es évek elején viszont nem volt meg a szükséges technikai háttér, amire a szimulációk alapján szükség lett volna a részecskegyorsítás jó hatásfokkal történő megvalósításához. Szerencsére az elmúlt évtizedben is jelentős fejlődésnek örvendhetett a THz-es impulzusok előállítására irányuló kutatás[7-9], ezzel lehetővé téve a néhány 100 μm -es és néhány mm-es hullámhosszal jellemezhető sugárzáson alapuló részecskegyorsítók kísérleti megvalósítását[10-13], valamint az ezeket elősegítő és optimalizáló numerikus eljárások [14, 15] alkalmazását is. Mindezeknek köszönhetően manapság a részecskegyorsítás a THz-es impulzusok felhasználásának a legkutatottabb és az egyik leggyorsabban fejlődő területei közé tartozik. A THz-es sugárzáson alapuló részecskegyorsító nagy előnye a többi optikai úton megvalósuló gyorsító elrendezéssel szemben, hogy a hullámhossz akár két nagyságrenddel is hosszabb lehet, mint például a látható vagy infravörös tartományon működő lézerekéhez képest, ezzel megnövelve a részecske és a gyorsítótér közötti interakció hosszát. Mára már számos területen alkalmaznak THz-es impulzusokat, többek közt a már említett részecskegyorsítás[10, 11, 14, 15], az anyagtudomány[16-19], a biztonságtechnika[20, 21], valamint a biológia [22, 23] területén, illetve az orvostudományban [24] is.

A PTE TTK Fizikai Intézetben 2018-ban kidolgoztak egy THz-es impulzusokon alapuló részecskegyorsító elrendezést[14], melyben egy ultrarövid (femtosekundumos) impulzussal ionizálnak kriptongázfelhőt. Az eljárás hatására egy, illetve többszörösen ionizált kriptonok és

ennek megfelelő mennyiségű elektron keletkezik. Az elektronokat két egymással szemben haladó és azonos paraméterekkel rendelkező közel egyciklusú fókuszált THz-es impulzus precíz időzítésével gyorsítják nagy hatásfokkal. A két gyorsító impulzus térerősségvektora egy síkba esik és egy irányba mutat tehát összeadódnak, míg a mágneses terek az elektronok keletkezési helyén kioltják egymást. Mindezek következtében az elektronok egy jól meghatározott irányba fognak gyorsulni, amit az 1.a) ábrán szemléltetnek. A precíz időzítés alatt azt értjük, hogy a THz-es impulzusok térerőssége a fókuszban pontosan akkor vált előjelet, amikor az elektronok keletkeznek. Ezt az időpillanatot és az ekkor kialakuló térerősséget mutatja az 1.b) ábra. A fekete és a szürke görbe a két egymással szemben haladó THz-es impulzus térerősségfutását, a piros pedig a kettő eredőjét ábrázolja.



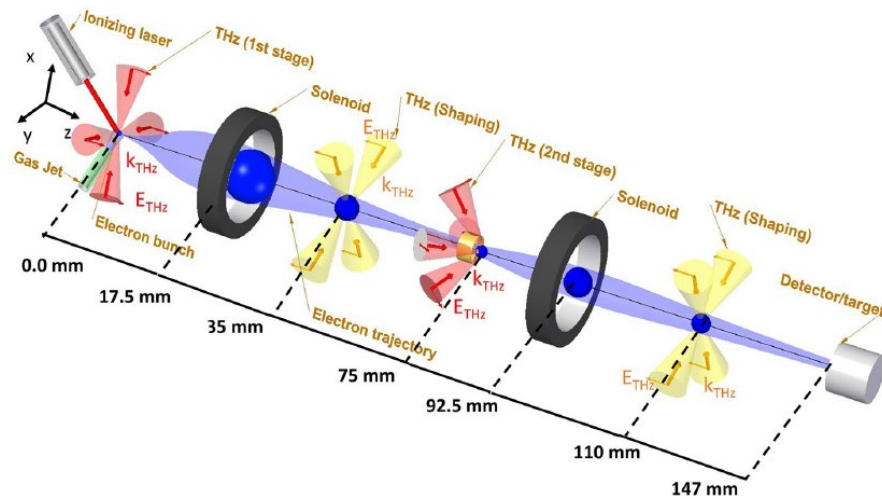
1. ábra. a) A két egymással szemben haladó fókuszált THz-es impulzuson alapuló elektrongyorsító elrendezés sematikus ábrája, ahol a kék folt jelöli az elektronok keltésének a helyét.

b) A két impulzus (szürke és fekete) és azok eredőjének (piros) térbeli lefutása az elektronok keltésének pillanatában[14].

A THz-es impulzusokon alapuló részecskegyorsítás nagy előnye a többi optikai elven működő (látható vagy infravörös lézerekkel hajtott) gyorsítókhoz képest, hogy a hullámhossz két nagyságrenddel nagyobb. Ennek következtében a töltött részecskék és a gyorsítótér közötti interakció időbeli hossza is megnövelhető, valamint kevésbé érzékeny az időbeli asszinkronításra a gyorsító elrendezés, ezáltal egyszerűbbé téve a kivitelezést.

2021-ben Dr. Turnár Szabolcs és munkatársai publikálták az előzőekben bemutatott elrendezésnek egy továbbfejlesztett változatát[15]. A numerikus szimulációban kettő helyett négy darab, páronként egymással szemben haladó fókuszált THz-es impulzus végzi az elektronok gyorsítását. A gyorsítást követően az elektroncsomó keresztülhalad két kompressziós fázison is. Először egy szolenoid tekercs segítségével transzverzális irányban. Ezt követően újabb négy, páronként egymással szemben haladó és a gyorsító impulzusokéhoz

képest ellentétes polarizációval rendelkező THz-es impulzusokkal longitudinális irányban is összenyomják az elektroncsomót. Végül pedig az előzőekben bemutatott gyorsító eljáráshoz hasonlóan utógyorsítják az elektroncsomót. Ezen elrendezésnek a sematikus ábráját mutatja a 2. ábra.



2. ábra. A továbbfejlesztett kompakt elektrongyorsító elrendezés sematikus rajza[15].

Ezzel a rendkívül kompakt („table-top”) elrendezéssel az elektroncsomó átlagos energiáját 346 keV-ra becsülik, melynek időbeli hossza 200 fs (FWHM). Az értékek alapján kijelenthető, hogy a szimulációk által jósolt ultrarövid elektroncsomók alkalmasak lennének többek között röntgendiffrakciós mérések elvégzésére is. Az eredmények publikálását követően az intézetben elkezdtek dolgozni egy újabb elektrongyorsító kísérleti megvalósításán. A kutatói munka napjainkban is zajlik.

A dolgozatomban egy olyan jövőbe mutató THz-es impulzusokon alapuló elektrongyorsító elrendezést fogok megvizsgálni, amellyel relativisztikus elektroncsomók (azaz az elektronok közel 1 MeV energiával rendelkeznek, tehát közel fénysebességgel haladnak) lennének előállíthatók. Tulajdonságaikat tekintve pedig szolgálhatnának nagyobb elektrongyorsítók forrásaként, illetve alkalmasak lennének egyéb mérésekben való felhasználásra is (pl. anyagszerkezeti vizsgálatok vagy kémiai folyamatok vizsgálata).

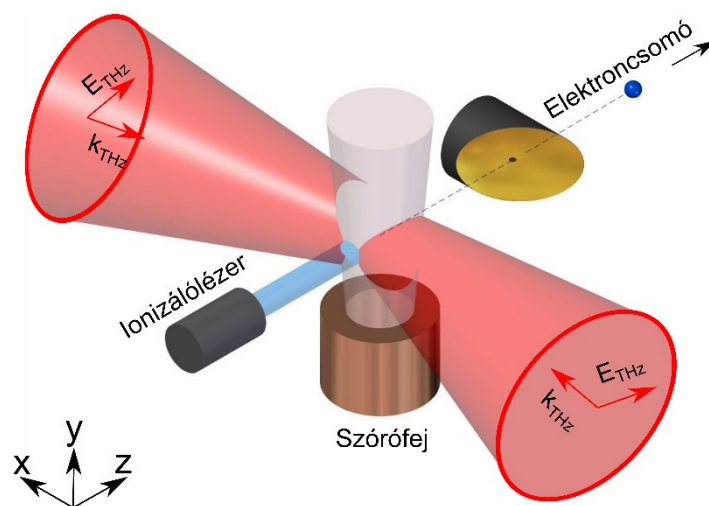
A következő fejezetben ismertetem az általam vizsgált modell részletes felépítését, valamint feltárom a modellben megoldandó problémákat és kérdéseket. Ezt követően bemutatom az általam használt szoftvereket, valamint a szükséges elméleti háttérrel, melyet megismerve, illetve alkalmazva megvizsgálom a modell különböző részeit (elektronforrás,

gyorsítás) a jósolt elektroncsomó alkalmazhatóságának szempontjából. A harmadik fejezetben kerül sor a vizsgálatok során kapott eredmények, továbbá a következtetések ismertetésére. Mindemellett összefoglalom a dolgozatomban részletezett célokat és eredményeket.

II. Eszközök és módszerek ismertetése

II.1 Modell bemutatása

A dolgozatomban vizsgálni kívánt modell a [14]-es kéziratban ismertetett elrendezéshez nagyon hasonló. Az elektronokat egy kripton gázfúvóka ionizálásával keltem, amelyhez egy ultrarövid (femtoszekundumos) lézert tételezek fel. A lézer hullámhossza 257,5 nm. A keltett elektronokat két, egymással szemben haladó nagy energiájú THz-es impulzus megfelelő időzítésével gyorsítom. A gyorsító impulzusok csúcs térerőssége ~ 40 MV/cm. A számolások során egy nem régiben megjelent kéziratban [25] szereplő ionizáló elrendezést vizsgáltam meg (3. ábra) az általam szimulált fúvókaműködés eredményeit alapul véve, a fúvókától különböző távolságokra vizsgálódva. Ezt követően az impulzusok megfelelő időzítésének finomhangolásával optimalizáltam az elektroncsomó kinetikus energiát, majd megvizsgáltam a gyorsított elektroncsomók tulajdonságait, azok alkalmazhatósága szempontjából.



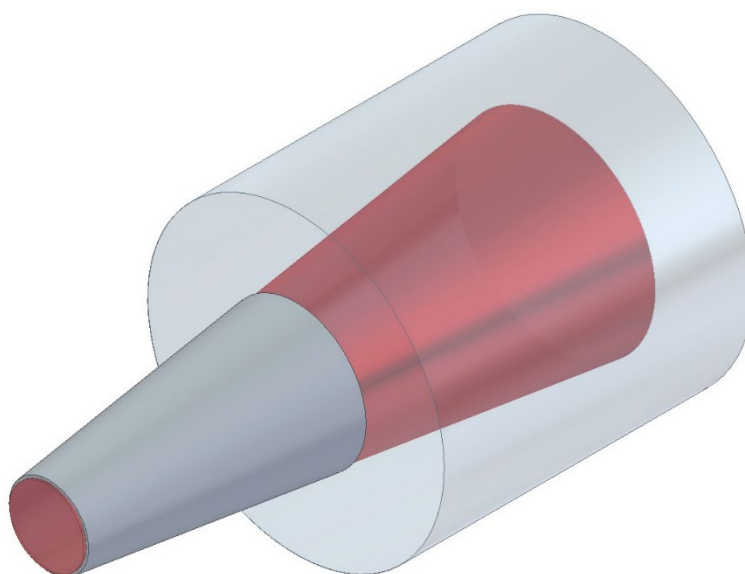
3. ábra. A vizsgált elektrongyorsító struktúra sematikus ábrája. Az ábrán az ionizáló lézer látható kék színnel jelölve, a THz-es impulzusok pedig pirossal[25].

A munkám célja, hogy esetvizsgálataimmal feltárjam, milyen eddig az intézetben nem vizsgált további összefüggéseket, paramétereket érdemes figyelembe venni, olyan elektrongyorsító elrendezések esetén, melyekben az elektronok előállítása valamilyen

gázfúvókából kiáramló gáz ionizációjával történik. A következő három alfejezetben az elrendezés különböző részeinek vizsgálatához szükséges szoftvereket és az elméleti hátteret fogom ismertetni.

II.2 Gázfúvóka tervezése és vizsgálata

Annak érdekében, hogy az ionizációs eredmények minél jobban tükrözzék a valóságot a munkám kezdetén megterveztem egy kripton gázfúvókát 3 dimenzióban és numerikusan megvizsgáltam. Számos szimulációt végeztem annak érdekében, hogy tanulmányozzam és megértssem a turbulens áramlások fizikáját. Ezalatt értem azt, hogy különböző nyomást feltételezve vizsgáltam meg a kialakuló sűrűséget és a kripton részecskék sebességét a fúvókától különböző távolságokban, különböző szórófej (*nozzle*) kialakítások esetén. A szimulációk megfelelő felparaméterezése érdekében először egy publikált mérés eredményeit reprodukáltam, majd azt alapul véve folytattam munkásságom. A 4. ábra mutatja a [26]-es kéziratban vizsgált szórófej szimulációjához tartozó 3D struktúrát. A szórófej egy 300 μm -ről 550 μm -re táguló kúp, amely 1 mm hosszú (a szórófej falának a tengellyel bezárt szöge $\sim 7^\circ$), a szórófejet pedig vákuum tér követi.



4. ábra. A szimulált elrendezés 3D tervezett modellje. Elöl a gázfúvóka (fém kúp) és a vizsgált vákuum tér (átlátszó henger), benne pedig az áramló kripton gáz (piros színnel jelölve).

Az áramlási problémák vizsgálatára a véges térfogat metódust (FVM) használja a legtöbb megoldó (*solver*). Ezt alkalmazva egy térháló pontjain kiszámolhatjuk a különböző mennyiségeket. Ehhez először fel kell bontani a geometriát térben, ezzel létrehozva a térhálót, aminek a pontjaiban határozzuk meg a mennyiségek értékeit. Erre számos különböző

ingyenesen hozzáférhető szoftver áll rendelkezésünkre (pl. Cfmesh, Gmesh), de akár manuálisan is írhatunk rá algoritmusokat. Leggyakrabban áramlási problémáknál tetrahedrális térhálót szoktak alkalmazni, de használhatunk négyszög alapú (Descartes) térhálót is. Továbbá a számolás leegyszerűsítése érdekében létrehozhatunk adaptívan változó méretű cellákat, ezzel bizonyos helyeken (pl a szórófejben) megnövelhetjük a felbontást vagy máshol csökkenthetjük, így csökkentve a számítási kapacitás igényét a számolásoknak. A térháló létrehozásánál figyelembe kell venni, hogy minél nagyobb a felbontás, annál pontosabb eredményeket fogunk kapni a számolás végén. Ha elkészítettük a térhálót, definiálni kell a cellákban a probléma szempontjából megfelelő kezdeti értékeket és az áramlásban résztvevő anyago(ka)t, illetve azok tulajdonságait is ismernünk kell. Turbulens áramlás során a Reynolds-átlagolt Navier-Stokes (*Reynolds-averaged Navier-Stokes* - RANS) egyenletet kell megoldani [27, 28] a nyomás és a sebesség értékek meghatározásához, ami az általános Navier-Stokes egyenletet a Reynolds szám egyfajta időátlagolásával közelíti. Az (1)-es egyenlet egy összenyomhatatlan Newtoni folyadék stacionárius áramlását leíró RANS egyenlet Descartes koordináta rendszerben felírva:

$$\rho \bar{u}_l \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial r_l} = \rho \bar{f}_k + \frac{\partial}{\partial r_l} \left[-\bar{p} \delta_{k,l} + \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial r_l} + \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial r_k} \right) - \rho \overline{u'_k u'_l} \right] \quad (1)$$

, ahol ρ a folyadék sűrűsége, $\bar{u}_\alpha$ az α irányú átlagos sebesség ($\alpha \in [x, y, z]$), r a helyvektor (x, y, z), $\bar{f}_k$ a külső erők, $\bar{p}$ az átlagos nyomás, μ a folyadék dinamikus viszkozitása, u' a sebesség fluktuációját jelöli és $\overline{u'_k u'_l}$ az úgynevezett Reynolds stressz. A Reynolds szám (2) megmondja, hogy az áramlás milyen jellegű. Kis Reynolds szám esetén (jellemzően $Re < \sim 2000$) általában az áramlás lamináris, amikor a Newton-i erő a domináns az áramlás során, nagy Reynolds szám esetén ($Re > \sim 2000$) pedig jellemzően turbulens áramlásról beszélünk, amikor a viszkózus erő lesz domináns, ami az anyag viszkozitásából származik.

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} \quad (2)$$

, ahol ρ a folyadék sűrűsége, u az áramlási sebesség, L a karakterisztikus hossz és μ a folyadék dinamikus viszkozitása. Ha sikerült meghatározni a nyomás értékeket, akkor feltételezve, hogy az áramlásban résztvevő anyag (esetünkben kripton gáz) ideális gáz, a sűrűséget az ideális gáz állapot egyenletéből a (3) egyenlet alapján számolhatjuk.

$$\rho = \frac{P}{k_b T} \quad (3)$$

, ahol P a nyomás, k_b a Boltzmann állandó és T a hőmérséklet. A számolások során kapott adatokat könnyedén ábrázolhatjuk és kiértékelhetjük például Origin segítségével. Alkalmazva a program nyújtotta lehetőségeket egyszerűen meghatározható a sűrűség eloszlása a geometria különböző szakaszain vagy felületein, illetve az eloszlások bizonyos paraméterei, amiket felhasználva az eredmények tovább vihetők az ionizációs szimulációkba. Az ionizációs szimulációk megvalósításáról a következő fejezetben írok részletesen.

II.3 Ionizáció vizsgálata

A modell vizsgálata során a következő lépés az elektronforrás vizsgálata. Az elektronok, mint már említettem, kriptongáz ionizálásával keltődnek. Az ionizáció vizsgálatára az EPOCH néven ismert, az angliai Warwick University kutatói által fejlesztett Particle-in-Cell (PIC) technikán alapuló szoftvert használtam, amiben a fűvóka vizsgálata során kapott eredmények alapján definiáltam különböző paraméterekkel rendelkező semleges kriptongázfelhőt. Az ionizáció során az áramló kriptongázfelhőben elektronok keletkeznek egy, illetve többszörösen ionizált kriptonok kíséretében. A gyorsító impulzusok hatására pedig a töltött részecskék elkezdenek gyorsulni a polarizáció síkjában. A pozitív és negatív töltésű részecskék gyorsításának iránya ellentétes lesz azonos gyorsítótér esetén. Mivel a kripton jelentősen nehezebb az elektronnál, ezért a gyorsítás esetében alig észrevehető sebességnövekedéssel fog járni és azt tapasztaljuk, hogy az elektronok kiválnak a kriptonrészecskék közül.

Az EPOCH egy Linux operációs rendszerre épülő, terminálból futtatható szoftver. A szoftver a szimulációs teret rektilineáris, azaz derékszögű cellákra osztja fel a felhasználó által előre megadott finomsággal, majd megoldja a Maxwell egyenleteket (4-7) a cellákra vonatkozóan.

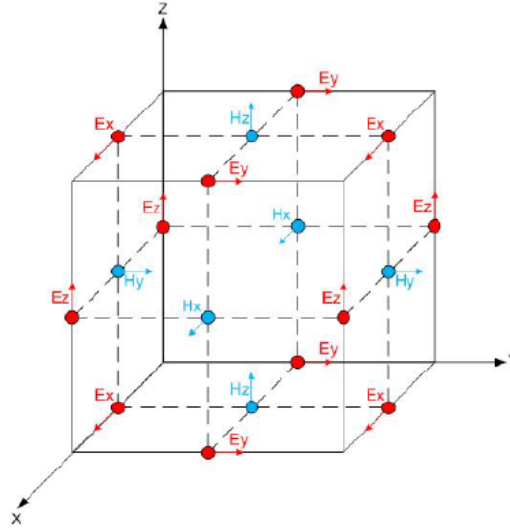
$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (5)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (6)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (7)$$

ahol $\mathbf{E}$ a térerősség vektor, ρ a töltéssűrűség, ϵ_0 a vákuum elektromos permittivitása, $\mathbf{B}$ a mágneses indukció vektor és μ_0 a vákuum mágneses permeabilitása. A szoftver a végeskülönbségű időtartomány (FDTD) módszert, azaz végesen kicsi időléptéket alkalmazva oldja meg a differenciálegyenleteket minden cellára vonatkozóan, hogy kiszámítsa az ott kialakuló elektromos és mágneses térerősségvektorok értékét. A cellákban kialakuló elektromos és mágneses teret leíró vektorokat szemlélteti az 5. ábra:

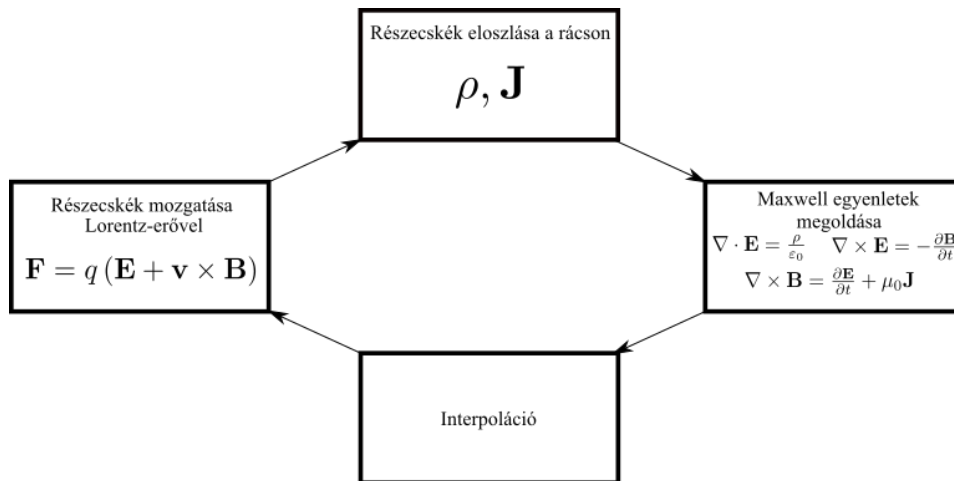


5. ábra. FDTD metódus eredményeképp kapott elektromos és mágneses térerősségvektorok a cellákban[29].

A szimuláció első időléptéke előtt a szoftver a felhasználó által megadott térbeli eloszlásnak (ρ) és részecskeszámnak megfelelően stacionárius pszeudo-részecskéket rak le, miközben a pillanatnyi áramsűrűség ($\mathbf{J}$) értéke zérus. Ezt követően egy négy lépésből álló körfolyamatot kezd el ismételni az algoritmus. A részecskék elhelyezése után (inicializáló lépés) elkezd megoldani a Maxwell egyenleteket, majd az így kapott értékeket interpolálja a rácsra az adott időpillanatban. A következő lépésben meghatározza a tér részecskékre való hatását, valamint a részecskék egymásra gyakorolt hatását, azaz az egyes részecskékre ható Lorentz-erőt (8). Következő lépésként a kiszámolt erőhatásoknak megfelelően elmozdítja a részecskéket.

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (8)$$

Végző lépésként pedig az iterációban megvizsgálja az újonnan kialakult részecskeeloszlást a szimulációs tartományban. Véges kicsi időbeli léptékekkel haladva ez a folyamat (6. ábra) ismétlődik a megadott szimulációs időpillanatig.



6. ábra. EPOCH számolási algoritmusát bemutató folyamatábra[30].

Az ionizációt tekintve az EPOCH figyelembe vesz négy különböző ionizációs metódust[29]:

1) Többfotonos ionizáció (Multi Photon Ionisation – MPI): Ekkor az elektronok több foton elnyelésével tesznek szert a mag vonzásából való kilépéshez szükséges energiára.

2) Alagúteffektus (Tunneling): Az elektronok kvantummechanikai tulajdonságaik miatt bizonyos valószínűséggel tartózkodhatnak az úgynevezett klasszikusan tiltott tartományban, azaz kiléphetnek a mag potenciáljából. Ez a valószínűség függ az ott lévő elektromágneses tér nagyságától. Minél erősebb a tér annál nagyobb valószínűséggel szakadhat le az elektron az atommagról[31].

3) Ütközéses ionizáció (Coulomb-collision): A szabad elektronok ütközhetnek kötött elektronokkal. Ennek következtében elektronok lökődhetnek ki az atom elektronhéjairól vagy akár le is kötődhetnek az ütközés során.

4) „Klasszikus” ionizáció (Barrier Supression Ionisation – BSI): Kellően nagy elektromos térbe helyezett atomról a tér leszakít elektronokat.

A felsorolt ionizációs folyamatok kezelésére a fejlesztők külön kapcsolókat biztosítottak, amelyek segítségével tetszőlegesen alkalmazhatjuk, vagy akár számolásonként külön-külön ki- és be is kapcsolhatjuk őket. Egy szimuláció futtatásához az adott folyamatra specifikusan saját kódokat kell írunk. A kódok jellemzően hét különböző részre (blokkokra) bonthatóak, amik változókból, kapcsolókból és függvényekből állnak. A blokkok típusa lehet *Constants*, *Control*, *Species*, *Boundaries*, *Laser*, *Window* vagy *Output*. Ezek közül a *Control*, a *Boudaries* és az *Output* blokk az, amelyeknek minden számolásban kivétel nélkül szerepelniük kell. E három blokkban tudjuk definiálni a szimuláció célját, pontosságát, időbeli hosszát, illetve definiálhatjuk a peremfeltételeket és a kimenteni kívánt adatokat, továbbá azok struktúráját is.

A többi, úgynevezett opcionális blokk segítségével pedig definiálhatunk például saját változókat, a részecskék tulajdonságait, további peremfeltételeket vagy akár egy időben mozgó ablakot is, amelynek segítségével egyszerűen követhetünk mozgó részecskéket.

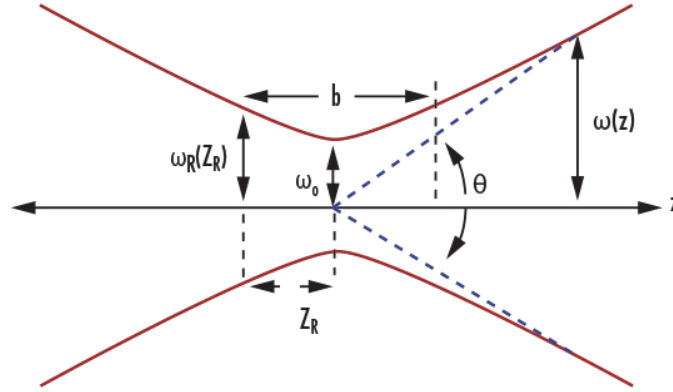
A következőkben nagy vonalakban ismertetem, hogy miként épülnek fel az általam használt EPOCH szimulációs kódok (szkriptek). A legelső és egyik legfontosabb, hogy a *Control* blokkban meg kell adnunk a szimulációs tér felbontásának a finomságát, ami nagyban meghatározza a Maxwell-egyenlet megoldó pontosságát. Emellett meg kell adni a szimulációban kezdetben résztvevő részecskék számát, a szimuláció időbeli hosszát, illetve az ionizációs kapcsolókat is itt kezelem. A szimulációk során mind a négy említett ionizációs eljárást figyelembe vettem. A peremfeltételek is kritikus részét képezhetik egy-egy szimuláció futtatásának. A határok viselkedésének definiálásánál adhatunk meg a részecskék és a tér szempontjából különböző feltételeket is, de kezelhetjük őket egyszerre. Beszélhetünk nyitott határokról vagy úgynevezett CPML (*Convolutional Perfectly Matched Layer*) határokról, melyek elnyelik a beáramló elektromágneses teret. Ez a két peremfeltétel a részecskéket egyszerűen úgy kezeli, hogy ha azok átlépnek a számolási tartomány szélét, akkor egyszerűen törlődnek a vizsgált rendszerből. A számolások során nyitott peremfeltételt használtam. A peremfeltételeknél adhatunk meg lézerforrás(oka)t is. Amikor az egyik peremfeltételnek lézerforrást adunk meg, akkor létre kell hoznunk egy *Laser* blokkot, amiben konkretizáljuk a lézer tulajdonságait. Definiálhatunk folytonos üzemű lézerforrást vagy impulzus üzemű lézert. Ehhez rendelkezésünkre állnak az amplitúdó, hullámhossz, fázis, polarizáció és a térbeli/időbeli profil (burkoló) definiálására szolgáló változók. Egy Gauss-eloszlású impulzus definiálásához például segítségünkre van továbbá egy beépített *gauss* függvény is, aminek megadásával egyszerűen adhatunk ilyen eloszlást követő burkolókat. Ennek három bemeneti paraméteréből az első a független változó, a második a gauss-profil közepe, a harmadik pedig az eloszlást jellemző szélesség. A $gauss(x, x_0, w)$ deklarációjú függvényt a szoftver a következőképpen definiálja[32]:

$$f(x) = e^{-\left(\frac{x-x_0}{w}\right)^2}, \quad (9)$$

, melyből a félértékszélességet a (10) egyenlet alapján számolhatjuk[32]:

$$FWHM = 2w\sqrt{\ln 2} \quad (10)$$

Egy fókuszált impulzus felparaméterezéséhez ismernünk kell a Gauss-nyaláb főbb paramétereit (7. ábra), mint például a nyalábnyak sugarát (w_0), a fókusz távolságot, a Rayleigh hosszt, a görbületi sugarat, valamint a Gouy fázist[30].



7. ábra. Gauss nyaláb főbb paramétereit.

A Rayleigh hossz megadja azt a fókusztól mért távolságot, ahol a nyalábsugár a nyalábnyak $\sqrt{2}$ -szerese lesz:

$$z_R = \frac{\pi w_0^2}{\lambda} \quad (11)$$

, ahol w_0 a nyalábnyak sugara és λ az impulzus hullámhossza. A görbületi sugar a fókuszhoz közeledve értelemszerűen egyre kisebb, a fókuszban pedig a végtelenhez tart, tehát a fókuszpontban a hullámfrontok kiegyenesednek (8. ábra). Ezt a fejlődést x irányban haladó impulzus esetében a következőképpen írhatjuk le:

$$R_c(x) = x \cdot \left[1 + \left(\frac{z_R}{x} \right)^2 \right] \quad (12)$$

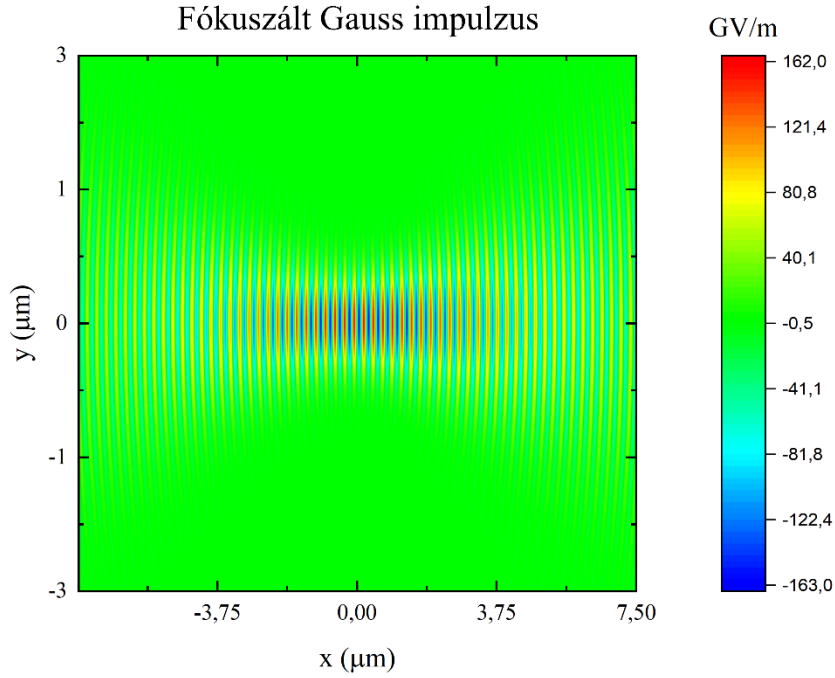
Egy x -ben haladó impulzus foltméretének, azaz annak haladására merőleges irányban való kiterjedésének, a fejlődését a következő formában adhatjuk meg:

$$w_x(x) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{x}{z_R} \right)^2} \quad (13)$$

Végül pedig az említett Gouy fázis, mely a nyaláb haladása során változtatja az impulzus fázisát, ahogy a neve is sugallja. $-\infty$ -ból indulva $-\frac{\pi}{2}$ -vel tolja el a fázist és folyamatosan nő $+\frac{\pi}{2}$ -ig amíg el nem ér $+\infty$ -be:

$$g_{phase} = \tan^{-1}\left(\frac{x}{z_R}\right) \quad (14)$$

Az itt felsorolt definíciók segítségével EPOCH-ban sikeresen definiáltam egy x tengely mentén haladó fókuszált Gauss impulzust (melynek intenzitása $10^{15} \frac{\text{W}}{\text{cm}^2}$, hullámhossza 257.5 nm és időbeli hossza 40 fs (FWHM)). A numerikus szimuláció eredménye a 8. ábrán látható.



8. ábra. $x=0$ -ba fókuszált Gauss nyaláb térerősség kontúrja EPOCH-ban szimulálva.

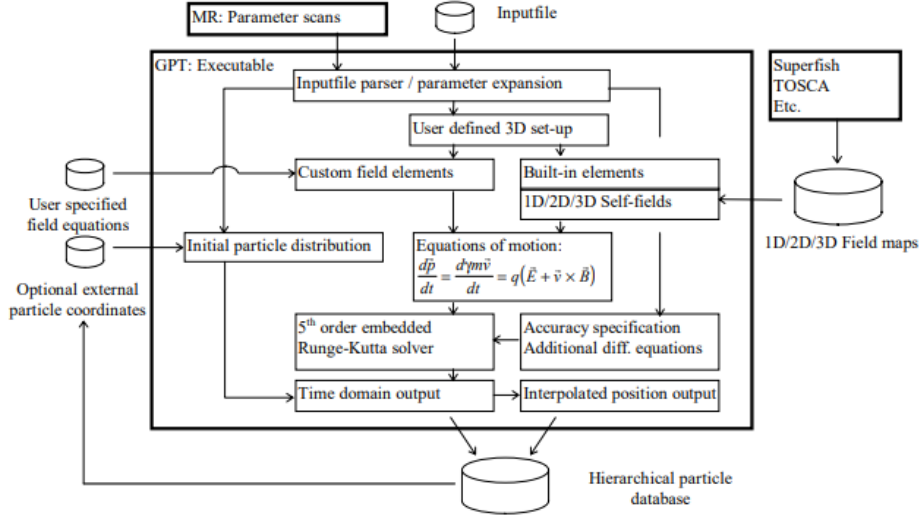
A lézer(ek) mellett az ionizációhoz definiálnunk kell a részecskéket és azok főbb tulajdonságait. Ehhez létre kell hoznunk egy *Species* blokkot és azon belül definiálnunk kell többek között a részecskék tömegét, töltését, darabszámát, valamint azok térbeli eloszlását, illetve megadhatjuk, hogy az egyes ionizációs szintek elérésekor milyen részecskék keletkezzenek. Ezzel meg tudjuk különböztetni a különböző ionizációs szinten keltett elektronokat. Az itt megadott ionizáció során keltett részecskéket egy külön *Species* blokkban szintén ehhez hasonlóan definiálnunk kell. A számolásaim során így módon definiáltam a semleges kripton részecskéket és a belőlük ionizáció során kilépő elektronokat. Ezek után már csak az *Output* blokk definiálása maradt hátra. Itt megadhatjuk, hogy mekkora időközönként, illetve melyik időpillanatokban szeretnénk kimenteni és mely értékeket. Például lekérhetjük a cellákban lévő térerősség értékeket, az oda vonatkozó részecskeszám-/töltéssűrűség értékeket, a részecskék hely koordinátáit, sebesség- és impulzusvektorait, azonosító számait, illetve bizonyos statisztikákat (pl. mennyiségek átlagos értékei).

Az eredményeket az EPOCH egy Self-Describing-File (SDF) formátumú fájlban tárolja el. Az ilyen adatok megjelenítésére különböző szoftvereket használhatunk, mint például a Visit, vagy a Paraview, amelyek képesek kezelni az ilyen adatstruktúrákat. Mindemellett használhatunk valamilyen programozási nyelvet (például MATLAB), mely segítségével szintén kinyerhetjük az SDF fájlok tartalmát, amivel felgyorsíthatjuk és könnyen automatizálhatjuk az adatfeldolgozást. A kiértékelés során én az utóbbi módszert használtam, tehát a nyers eredményeket MATLAB segítségével dolgoztam fel és a keltett elektroncsomagok, illetve azok legfontosabb tulajdonságait is MATLAB segítségével mentettem ki olyan formában, hogy azok a General Particle Tracer (GPT) szoftverbe átvihetők legyenek a gyorsítási szimulációk elvégzése érdekében. A gyorsítási fázis elvégzésének menetét a következő fejezetben részletezem.

II.4 Elektrongyorsítás

Az elektronok gyorsításának vizsgálatára a General Particle Tracer (GPT) nevű szoftvert használtam. A GPT egy olyan programcsomag, amelyet részecskék viselkedésének 3D-ben való nyomonkövetésére terveztek. Gyakran használják részecskegyorsítók, valamint nyalábutak tervezésére és vizsgálatára világszerte. A felhasználó szempontjából 2 alkalmazandó részből áll a szoftver. Egy futtatható állományból, amiben leírjuk a szimuláció menetét és definiáljuk a problémát, illetve egy elő- és utófeldolgozásra alkalmas interfészből áll, beleértve a adatfeldolgozó eszközöket és a grafikus felületet is, amely nagymértékben felgyorsítja a munkafolyamatot. A szimulációs térbe tetszőlegesen számos előre definiált elemet helyezhetünk el egyszerűen függvények segítségével, mint például mágneseket, tekercseket, gyorsító üregeket, elektromágneses impulzusokat, részecskeeloszlásokat. Ezek mellett van lehetőség például elektromágneses terek és részecskék fájlból történő importálására vagy exportálására is. A szoftver nagy előnye továbbá, hogy készíthetünk hozzá saját beépített elemeket is C++ programnyelven.

A 9. ábra mutatja a GPT szimuláció folyamatának egy sematikus ábráját[33]. Miután felépítettük a szimulációt (megadtuk az abban szereplő elemeket, részecskéket és definiáltuk a szükséges tereket), a szoftver analitikusan megoldja a részecskék mozgásegyenletét ötödrendű Runge-Kutta módszerrel és adaptív időbeli lépésköz szabályozással, figyelembe véve a Coulomb-kölcsönhatást is, melynek vizsgálatára és kezelésére problémától függően számos rutin áll rendelkezésünkre. A szimuláció eredményeit kimenthetjük adott időpillanatokban (*time domain output*) vagy adott helyen is (*interpolated position output*).



9. ábra. A GPT működésének folyamatábrája[34].

A szimuláció eredményeit kimenthetjük különböző fájlformátumokban további adatfeldolgozásra vagy használhatjuk a beépített grafikus kiértékelőt, amiben lehetőségünk van többek között akár a részecskék trajektóriájának kirajzoltatására is.

A szimulációk során a közel egyciklusú és erősen fókuszált THz-es impulzusok leírására egy speciális modellt használtam[35]. Ez a modell tartalmazza a longitudinális teret, amire az erős fókuszálás miatt van szükség, ugyanis ilyen esetben jelentős mértékű a kialakuló longitudinális tér, mely egyes esetekben befolyásolhatja a gyorsítás eredményét. Az impulzus frekvencia spektruma a Poisson eloszlást követi az impulzus rövidülése miatt. Ahogy közelítjük az egyciklusú esetet figyelembe veszi az impulzus haladásának kromatikus jellegét is, ami szintén az egyciklusú impulzusok esetében jelentős. A (15)-ös és (16)-os egyenlet ír le egy ilyen erősen fókuszált elektromágneses impulzust, ami az x tengely mentén halad, lineárisan polarizált a z tengely irányában és ω körfrekvenciával rendelkezik.

$$\vec{E}(x, z, \omega) = E_0 \frac{w_0}{w(x)} e^{-\frac{z^2}{w(x)^2}} e^{i\psi} \times \left[\hat{z} - \frac{2iz}{k} \left(\frac{1}{w(x)^2} + \frac{k}{2iR(x)} \right) \hat{x} \right] \quad (15)$$

$$\psi(x) = kx - \omega t + \frac{kz^2}{2R(x)} - \eta(x) + \phi_0 \quad (16)$$

, ahol $w(x) = w_0 \sqrt{1 + \left(\frac{x}{z_R}\right)^2}$ a nyaláb sugár, $R(x) = x[1 + \left(\frac{x}{z_R}\right)^2]$ a görbületi sugár, $\eta(x) = \arctan\left(\frac{x}{z_R}\right)$ a Gouy fázis az x tengely mentén, amerre halad az impulzus és ϕ_0 a vivő burkoló fázis (*Carrier envelop-phase* – CEP). Továbbá $k = \frac{\omega}{c}$ a körhullámszám, $z_R = \frac{\omega w_0^2}{2c}$ pedig a Rayleigh hossz, ami az a távolság, ahol az amplitúdó az $\frac{1}{e}$ -ad részére esik, amiben w_0 a nyalábnyaláb sugara.

Ebben a fejezetben ismertetett elméleti háttérrel és a bemutatott szoftverek segítségével létrehoztam egy több szoftvert magába foglaló komplex numerikus szimulációt, melynek eredményeit a következő fejezet tartalmazza.

III. Eredmények

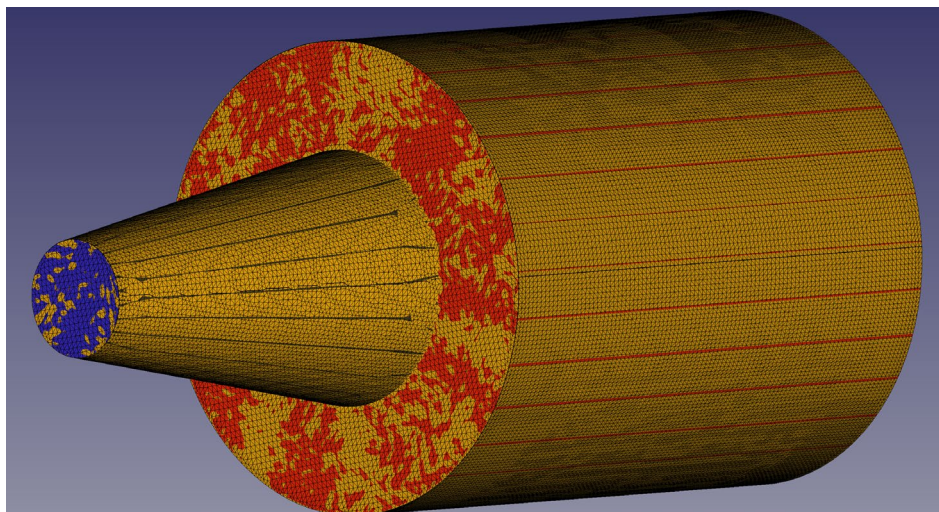
Ebben a fejezetben a II.1-es fejezetben bemutatott elrendezés vizsgálata során kapott eredményeket mutatom be három részre bontva. Először a kriptongázfűvőka működését vizsgáltam meg. Ezt követően a [25]-os kézirat alapján az egy darab ionizáló lézert tartalmazó ionizációs elrendezést vizsgálva EPOCH-ban ionizáltam több, különböző paraméterekkel rendelkező kriptongázfelhőt. Végül pedig a GPT szoftver segítségével elvégeztem azon elektronfelhők gyorsítását, melyek az EPOCH szoftver futtatásaiból származtak. A következő három alfejezetben ismertetem a három lépésben kapott eredményeket.

III.1 Kriptongázfűvőka

Az intézetben egy újabb kutatási irány a folyadékok és gázok áramlásának vizsgálata és ezen belül is számos elektrongyorsító elrendezés elektronforrásaként szolgáló gázfűvőkák vizsgálata. Ezért fontosnak tartom, hogy számolásaim helyességét alátámasszam validációs számításokkal. Erre a célra munkám első lépéseként a már korábban hivatkozott [26]-es kéziratban bemutatott S1-el jelölt fűvőkéval kapott részecskesűrűség eredményeket reprodukáltam. A kutatói munkát részletező kéziratban az ismertetett eredményeket kísérletileg is alátámasztották. A következő bekezdésekben bemutatom az általam validációs céllal elvégzett numerikus szimulációk eredményeit.

A cikkben az S1-el jelölt fűvőka egy 1 mm hosszú kúp, ami 300 μm -ról 550 μm -re tágul. A geometriát és a vizsgálatot tekintve a fűvőkát egy 1.25 mm hosszú és 1.2 mm átmérőjű vákuum henger követi. A vákuum belsejében négy különböző síkban vizsgálják a

részecskesűrűséget (a fúvóka szájától 500, 750, 1000 és 1250 μm -re). Az ennek megfelelően megrajzolt geometriát és a térhálót a 10. ábra mutatja.



10. ábra. A vizsgált geometria 3D-ben és rajta az alkalmazott térháló rajza.

A szimuláció második lépésében a térháló definiálása a számolás helyessége szempontjából kritikus rész lehet. A számolásaim során 25 μm -es alap cellahosszúságú tetrahedrális térhálót definiáltam. Emellett alkalmaztam az adaptív cellaméretezést is.

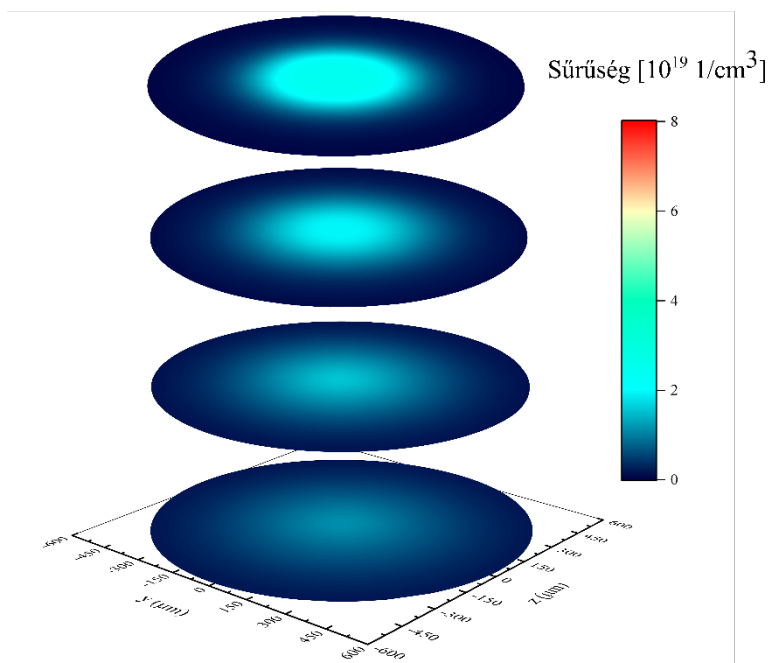
Következő lépésben a fizikai modellt kell meghatározni. A legtöbb megoldó tartalmaz egy vagy több viszkozitás modellt amely tartalmazza a turbulens áramlások definiálását. A turbulens áramlás viselkedését a turbulens kinetikus energiával és a turbulens energia átalakulásának (pl. hőenergiává átalakulásának) arányával (*dissipation rate*) definiáltam ($k\text{-}\omega$ modell). A megfelelő szabadáramlás meghatározására a *Shier Stress Transition* (SST) formalizmust választottam[36]. Ezt követően definiáltam a kriptont, mint ideális gázt és megadtam a szükséges tulajdonságait, amit az alábbi, 2. Táblázat tartalmaz.

1. Táblázat. A krypton megadott paraméterei.

Cp [J/kg K]	Hővezetés [W/m K]	Molekuláris tömeg [g/mol]	Referencia viszkozitás (μ_0) [kg/m s]	Referencia hőmérséklet (T_0) [K]	Effektív hőmérséklet (S_0) [K]
249.2	0.00922	83,798	$2,34 \cdot 10^{-5}$	273,15	233,15

A krypton viszkozitását a Sutherland törvény alapján definiáltam[37]. A törvény alapján meghatározhatjuk a krypton viszkozitásának értékét a hőmérséklet függvényében. A szórófej bemenetén 20 bar nyomást tételeztem fel és a szórófej falát adiabatikusnak választottam,

minden más felületet pedig kimenetnek definiáltam 1 Pa állandó nyomással. A számolás eredménye a kéziratban szereplő ábrának megfelelően a 11. ábrán látható.

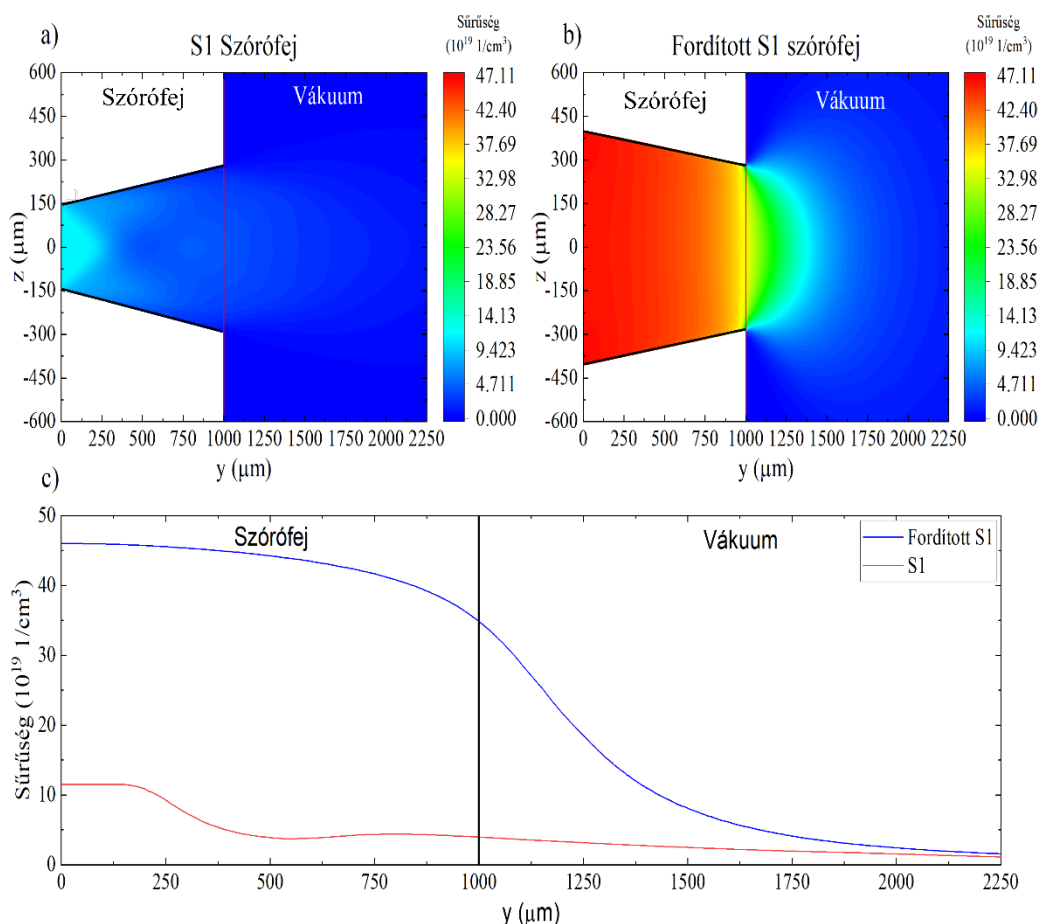


11. ábra. A [26]-es cikk-ben vizsgált S1-el jelölt fúvóka reprodukálásával kapott 2D sűrűség eredmények fentről lefele haladva a fúvóka szájától sorban 500, 750, 1000 és 1250 μm -re.

Az eredmények jól megfeleltethetők a [26]-es cikkben szereplő eredményeknek. Az eredményekben némi eltérést okozhat, hogy a kezdeti feltételeket feltehetőleg nem sikerült teljesen tökéletesen reprodukálnom. A szimulációk sikeresnek bizonyultak és sikerült jó közelítéssel visszakapnom a kísérleti eredményeket. Ezek alapján kijelenthető, hogy a későbbiekben általam felparaméterezett modell alkalmas további számolások elvégzésére. A továbbiakban megvizsgáltam több különböző fúvóka geometriát. A számolások során az egyik fő szempont az volt, hogy a fúvóka szájának átmérője minél kisebb legyen, ezáltal befolyásolva és minimalizálva a kiáramló kriptongáz átmérőjét, azaz későbbiekben az ionizált elektronfelhő hosszát. Erre azért van szükség, mert az ionizációs szimulációk számítás igénye igen nagy, így viszonylag alacsonyan kell tartani a szimulációs tér kiterjedését, hogy a szimulációk elvégezhetőek legyenek. Egy másik indok emellett, hogy a felbontás finomsága EPOCH-ban jelentősen befolyásolja az ionizáló lézerimpulzus terjedését és minőségét, ezért nem jelent megoldást, amennyiben a térbeli felbontást csökkentjük.

Először azt vizsgáltam meg, hogy milyen hatása van annak, ha a táguló szórófej helyett szűkülőt alkalmazunk. Ehhez a [26]-es kéziratban szereplő S1-es szórófejet vettem alapul és a

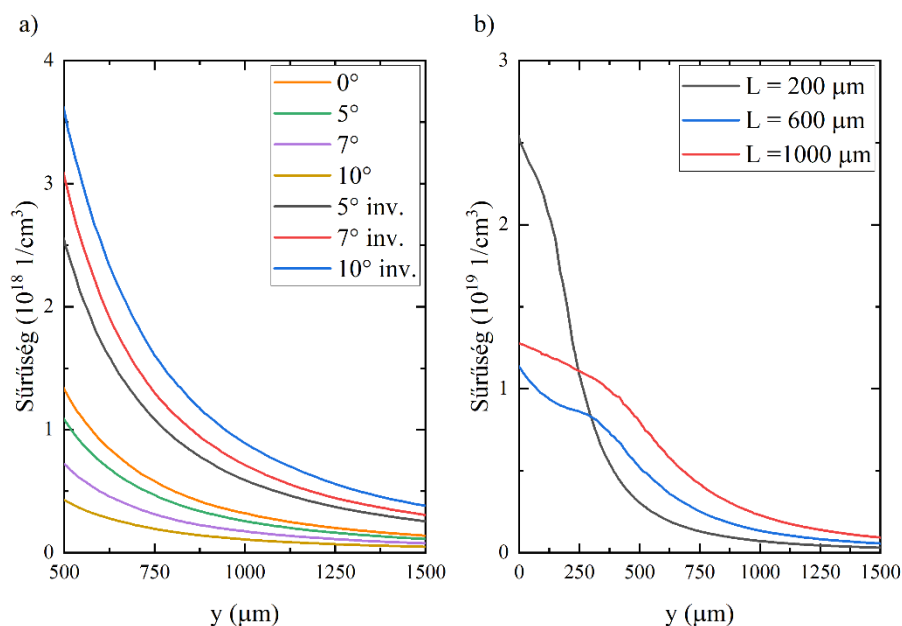
cikknek megfelelő beállítások mellett végeztem a szimulációkat ez esetben is. A szűkülő szórófej kimenetének átmérője szintén $550\text{ }\mu\text{m}$, valamint a fal dőlésszögét megfordítottam. Így tehát az új szórófej $800\text{ }\mu\text{m}$ -ról $550\text{ }\mu\text{m}$ -re szűkül. Az alábbi ábra tartalmazza a sűrűség alakulását a 2D-s kontúr és azok 1D-s hosszirányú metszén.



12. ábra. a) A 11. ábrán vizsgált szórófej 2D sűrűség kontúr ábrája. b) A 11. ábrán vizsgált szórófej összeszűkülő megfelelőjének 2D sűrűség kontúr ábrája. c) A két szórófej tengely menti 1D sűrűség grafikonya.

A numerikus szimulációk alapján kijelenthető, hogy a szűkülő fej esetében a sűrűség sokkal magasabb értékeket érhet el, viszont távolodva a szórófejtől gyorsan változik a sűrűség értéke. Az ionizálás kísérleti megvalósításánál fontos szempont, hogy milyen közel lehet megvalósítani az ionizációt a szórófej kimenetéhez képest, illetve, hogy mennyire pontosan lehet beállítani az ionizációnak a helyét. Mindezek alapján kijelenthető, hogy előnyösebb a táguló szórófej használata, hiszen azt alkalmazva az ionizált gázrész sűrűsége kevésbé változik a szórófejtől távolodva. Ezen megfontolás alapján a továbbiakban néhány táguló szórófejjel kapott eredményeimet ismertetem.

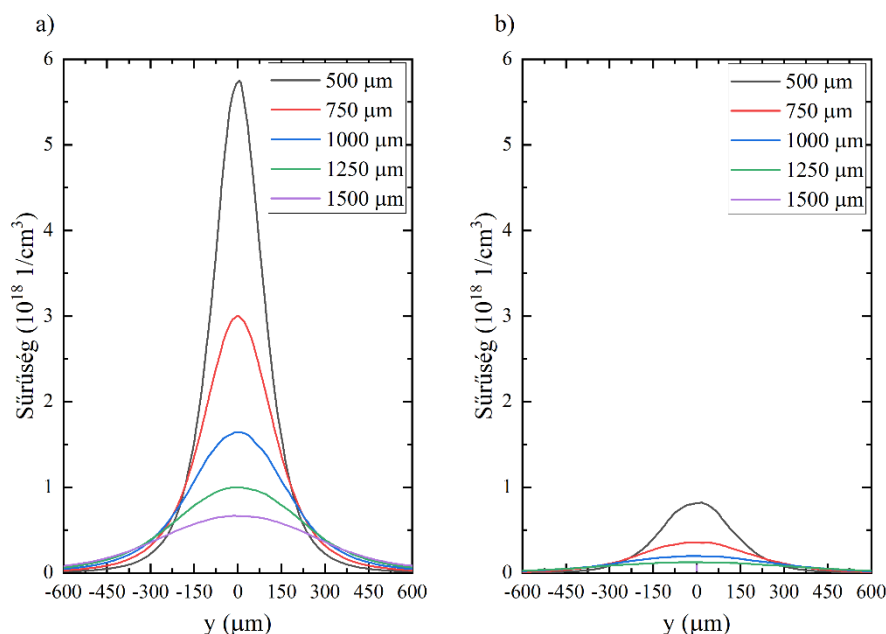
További számolásaim során azt vizsgáltam meg, hogy milyen hatással vannak a sűrűség alakulására a szórófej egyéb geometriai jellemzői; pl. a falának a dőlésszöge, illetve maga a szórófej hossza. Korábbi munkánk során az ionizációs számolásokban 100 μm -es átmérőjű gázsugarat feltételeztünk, mivel nagyobb átmérő esetén szélesebb lesz a gyorsítás utáni energiaspektrum, illetve a szimulációk hatalmas számítási kapacitás igénye miatt is célszerű volt minél kisebbet választani, persze valós keretek között. A dolgozatomban ebből kifolyólag közel azonos méreterekkel rendelkező szórófejeket vizsgáltam meg. A szórófej minden esetben tárgult a tengely mentén haladva 200 μm -en keresztül 0, 5, 7 és 10°-os szögben. Ezekben belül két esetet különböztettem meg. Egyik esetben a szórófej kimenetének átmérőjét fixáltam 100 μm -es értéken (alapeset), második esetben (inverz eset) pedig a bemenetének átmérőjét rögzítettem, illetve a 0°-os esetben egy 100 μm átmérőjű hengert vizsgáltam. Az így kapott eredményeket mutatja a 13. ábra a) grafikonja. Azt tapasztaltam, hogy alapesetben kisebb sűrűség értékeket kaptam ugyanolyan távolságra a szórófejtől, mint inverz esetben. Tehát minél kisebb a szórófej kimenete, annál kisebb lesz a mért sűrűség is adott távolságnál. Ez a tapasztalat konzisztens a vizsgált cikkben ([26]) leírtakkal. Mindezek felül megvizsgáltam, hogy milyen hatással van a szórófej hossza a sűrűség alakulására. Ezen eredmények láthatóak a 13. ábra b) részén. Az eredményekből arra következtethetünk, hogy minél hosszabb a szórófej, összességében egyenletesebb hosszirányú eloszlást kapunk és emellett az átlagos sűrűség is nő. Tehát egy hosszabb szórófejjel bizonyos mértékig lehet csökkenteni az elrendezés érzékenységét az ionizáció térbeli elhelyezkedésére való tekintettel, ami a gyakorlati megvalósításban előnyös lehet.



13. ábra. a) A sűrűség függése a szórófejtől 500-1500 μm -re 7 különböző szórófej esetén. Alapesetben (jelöletlen eset) a szórófej kimenetének átmérője 100 μm -es értékre van beállítva, inverz (inv.) esetben pedig a szórófej bemenetének átmérője van rögzítve. A 0° -os esetben egy 100 μm átmérőjű hengert vizsgáltam, mint szórófejt. b) A sűrűség függése a szórófej hosszától (L) a szórófejtől mért távolság tekintetében.

Munkám során a következő vizsgálati szempont a sűrűség transzverzális eloszlása volt, ugyanis az elektronfelhő kezdeti eloszlása gyorsítás során befolyásolni fogja a gyorsított elektroncsomó alakját. A gyorsításra használt THz-es impulzus hullámhosszra fókuszált ($\lambda = 1 \text{ mm}$), mely kísérleti megvalósítás esetén erős fókuszálásnak tekinthető. Annak érdekében, hogy a gyakorlatban ne szóródjon a THz-es sugárzás, a vizsgálatot a szórófejtől 1 mm-es távolságban lenne érdemes kezdeni, de a sűrűség eloszlás gyorsításra vonatkozó hatásának vizsgálata érdekében a szimulációkat elvégeztem a szórófejhez közelebb is. Tehát az ionizáció szimulációját a szórófejtől 500, 750, 1000, 1250 és 1500 μm -nél végeztem el. A 14. ábra mutatja az eredményeket két különböző szórófej esetén. Az a) ábrán látható eredmények esetén egy 1 mm hosszú inverz szórófejet alkalmaztam, $\sim 7^\circ$ -os dőlési szög esetén, a b) ábrán megfigyelhető eredmények esetén pedig egy 200 μm hosszú normál fűvókát használtam, melynek a fala szintén $\sim 7^\circ$ -ot zár be a tengellyel. Mindkét ábrán látható, hogy a szórófejtől távolodva egyre jobban ellaposodik (kiszélesedik) az eloszlás görbéje, illetve a csúcserték is folyamatosan csökken a távolsággal. Továbbá, az is szembetűnő, hogy a b) ábrán látható transzverzális irányú eloszlás sokkal egyenletesebb. A b) ábrán bemutatott eset tehát előnyösebb lehet egy kísérleti megvalósítás esetén. A továbbiakban, annak érdekében, hogy az ionizáció és ezzel együtt a

gyorsítás helyének megválasztásának a gyorsított elektroncsomagok eloszlására való hatását jobban szemléltethessem, az a) ábrán bemutatott eredményeket vizsgáltam.



14. ábra. Transzverzális sűrűség eloszlás a szórófejtől különböző távolságokra.
a) 1 mm hosszú $\sim 7^\circ$ -os inverz szórófej esetén. b) 200 μm -es normál 7° -os szórófej esetén.

A 14. a) ábra eloszlásgörbéire illesztettem Gauss-eloszlást ((9)-es és (10)-es egyenlet alapján), mivel ahhoz van a legközelebb a sűrűség eloszlás alakja és ezzel meghatároztam az eloszlás különböző paramétereit, amiket a 3. Táblázat foglal magába.

2. Táblázat. A sűrűség Gauss-eloszlásainak paramétereit.

Szórófejtől mért távolság [μm]	500	750	1000	1250	1500
Csúcsérték [10^{18} 1/cm^3]	5,74	3	1,64	0,99	0,66
FWHM [μm]	216,5	280	385	503	634

Ezen értékek segítségével már tudtam definiálni egy kripton gázfűvőkát EPOCH-ban az ionizáció elvégzéséhez. A számolások eredményeit a következő fejezetben foglalom össze.

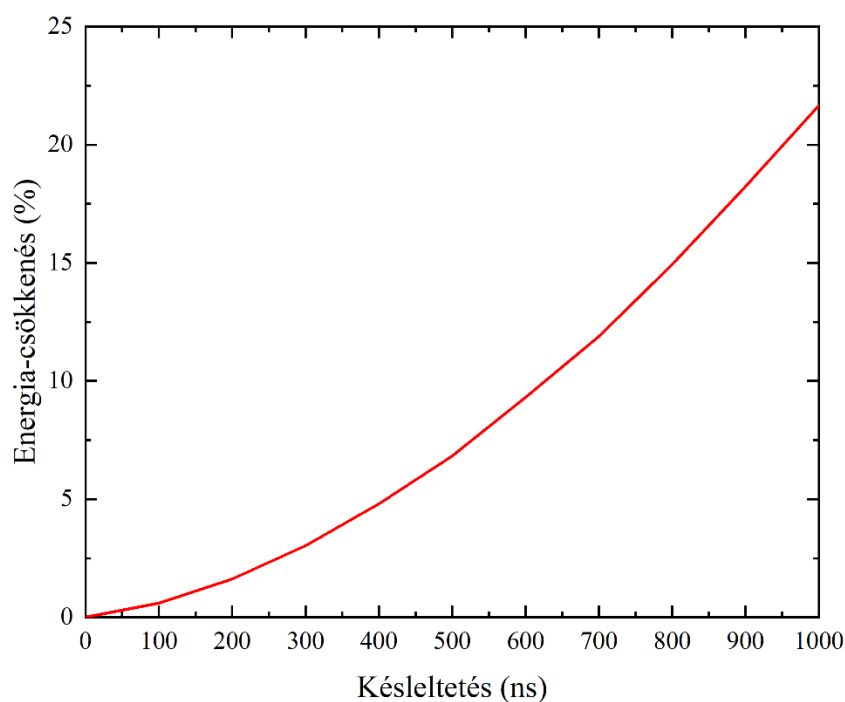
III.2 Ionizáció

Ebben a részben az előző alfejezetben kiválasztott szórófej eredményeivel számoltam tovább. Elsőként azt vizsgáltam meg, hogy van-e jelentősége a kripton részecskék sebességével számolni, amivel haladnak a gázáramlásban majd pedig elvégeztem az ionizációs szimulációt a szórófejtől különböző távolságokra. Ionizálásra a 3. ábrán látható elrendezés szimulációjával került sor. Az ionizáló lézer paramétereit a 4. Táblázat. tartalmazza.

3. Táblázat. Ionizáló lézer paramétereit.

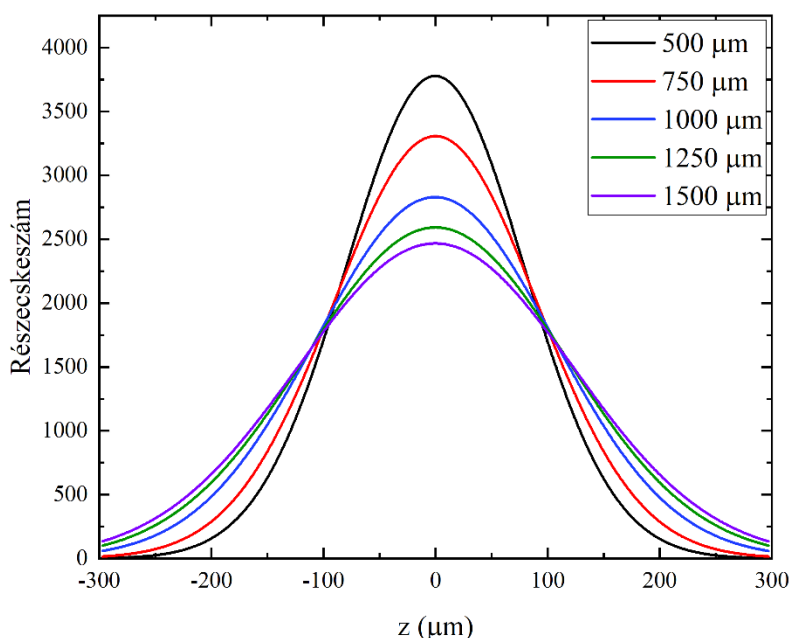
Hullámhossz [nm]	Impulzushossz [fs]	Nyalábnyak sugara [nm]
257,5	170	4800

A fűvókát tartalmazó szimulációkban tapasztalt maximális sebesség az ionizációs tartományon ~ 380 m/s-nak adódott. Ez a teljes gyorsítási folyamat ideje (100 ps) alatt sem jelent jelentős elmozdulást (~ 40 nm), így megfelelő időzítés mellett ez a tényező elhanyagolható, hiszen ekkora távolságon belül a gyorsítótér amplitúdója szinte változatlan. Viszont, ahogy a 15. ábra is mutatja, ha késleltetjük a gyorsító impulzusokat és a gyorsítás helyével nem korrigálunk, akkor a gyorsított elektroncsomó átlag energiája jelentősen csökkenhet (1 μ s-os késleltetés esetén akár 22 %-kal).



15. ábra. Kripton sebességének lehetséges hatása az elektron gyorsítás utáni energiájára a gyorsító impulzusok késleltetése esetén.

A következőkben a szórófejtől 500, 750, 1000, 1250 és 1500 μm -re ionizált elektroncsomók eloszlását mutatom be. A szimuláció elvégzéséhez 25 nm-es térbeli felbontást alkalmaztam. A hatalmas sűrűségértékek miatt pedig kénytelen voltam egyszerűsíteni az ionizációs számolásokon. Ugyanis az EPOCH is, mint a legtöbb részecskekövető szoftver makrorészecskéket használ, ami azt jelenti, hogy 1 részecske több elemi részecskével is felérhet és annak megfelelően viselkedik. Fontos megjegyezni, hogy minél nagyobb ez az arány annál pontatlanabb lesz a szimuláció. Esetünkben 10 millió részecskét feltételezve ez az arány átlagosan nagyobb, mint 1:1 000 000 000 volt. Ez azt jelenti, hogy amennyiben egy kripton is ionizálódik, akárcsak egyszer, az össztöltésben már 100 pC-os nagyságrendnek felel meg. További korlátozó tényező, hogy a pár darab makrorészecskének megfelelő valós elektroncsomónak az eloszlását sem tudjuk vizsgálni. Mindezek következtében számolásaim során 1:1 arányt alkalmaztam a célból, hogy meg tudjam határozni az elektroncsomó térbeli eloszlását. Ehhez körülbelül 40 millió kripton részecskét definiáltam és lenormáltam a III.1 fejezetben kapott eloszlásokat, hogy minden részecske átlagosan 1 kriptonnak feleljen meg. Így a szimuláció során a keletkezett elektroncsomó elszlása sokkal pontosabb lesz, ami a gyorsítás miatt nem elhanyagolható szempont. Az így kapott eloszlásoknak megfelelően minden vizsgált esetben egy 20 fC össztöltésű elektroncsomót hoztam létre, amelyek eloszlásait a 16. ábrán szemléltetem.



16. ábra. Az ionizálás során a fűvókától különböző távolságokra keletkezett elektroncsomók elektroneloszlásai a gyorsítás irányában.

Látható, hogy a szórófejhez közelebb az elektroncsomó sokkal keskenyebb eloszlást mutat a sűrűségeloszlásnak megfelelően. Ez a tény gyorsítás szempontjából azt jelenti, hogy jobb hatásfokkal gyorsítható az elektroncsomó, mivel koncentráltabban helyezkednek el a kripton részecskék, aminek köszönhetően várhatóan kisebb lesz gyorsítást követően az energiaszórás. A keletkezett elektroncsomók további jellemzőit a 5. Táblázat tartalmazza:

4. Táblázat. Ionizálás során keletkezett elektroncsomók paraméterei.

Szórófejtől mért távolság [μm]	Össztöltés [fC]	Térbeli hossz (FWHM) [μm]
500	20	186,5
750		213,1
1000		249,6
1250		274,6
1500		289,7

Az adatok szerint, ha az ionizálást 1 mm-el távolabb végezzük el a szórófejtől, a keletkezett elektroncsomó térbeli hossza akár a másfélszeresére is nőhet. Tekintve, hogy a gyorsítás során a THz-es impulzusok nyalábnyakának sugara a fókuszpontban 1 mm, ez jelentős méretbeli növekedés, hiszen 1500 μm-nél már a hullámhossz negyedénél is hosszabb az elektroncsomó. Ennek köszönhetően pedig várhatóan nagyobb lesz az elektroncsomó energiaszórása, mivel egyre nagyobb lesz a különbség a gyorsítótér amplitúdóját tekintve az elektroncsomó különböző részei esetén. A méretbeli növekedésnek a gyorsításra vonatkozó hatásait a következő alfejezetben szemléltem.

III.3 Elektrongyorsítás

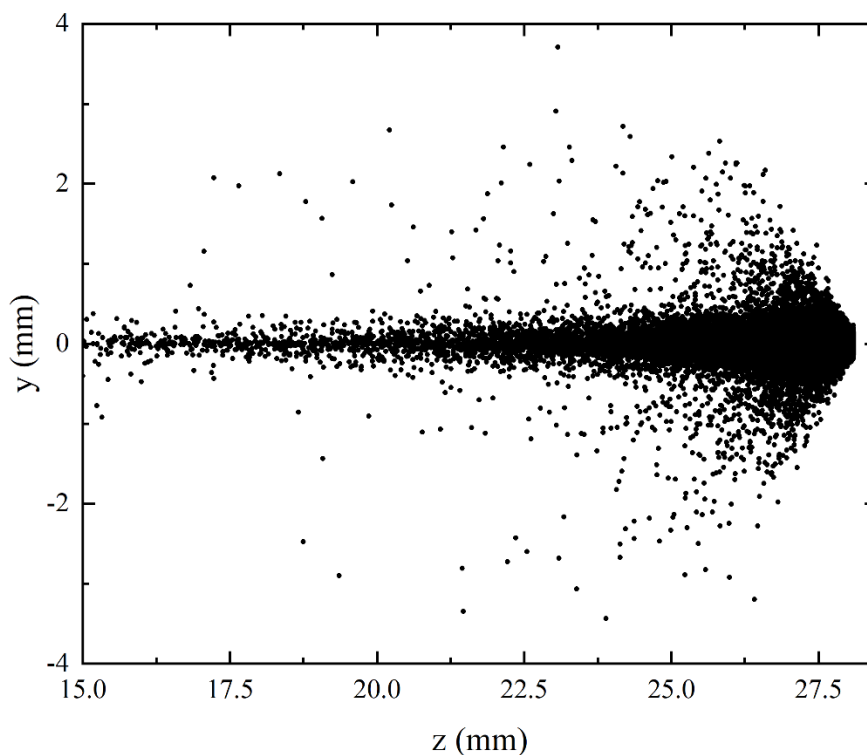
A gyorsítás szimulációi során célul tűztem ki, hogy tanulmányozzam milyen különbségeket okozhat az ionizáció, és ezáltal a gyorsítás pozíciójának megválasztása. A számolások során extrém nagy energiájú THz-es impulzusokat tételeztem fel. Ilyen impulzusokat kísérletileg előállítani rendkívül körülményes, így ezen eredmények egy jövőbe tekintő felhasználási lehetőséget tárnak fel, remélve, hogy a közeljövőben megvalósíthatóvá válnak.

Az elektrongyorsítás vizsgálata során 2 egymással szemben haladó és közel egyciklusú THz-es impulzust tételeztem fel. Ezen impulzusok paraméterei az 6. Táblázatban olvashatók.

5. Táblázat. A gyorsító THz-es impulzusok főbb jellemzői.

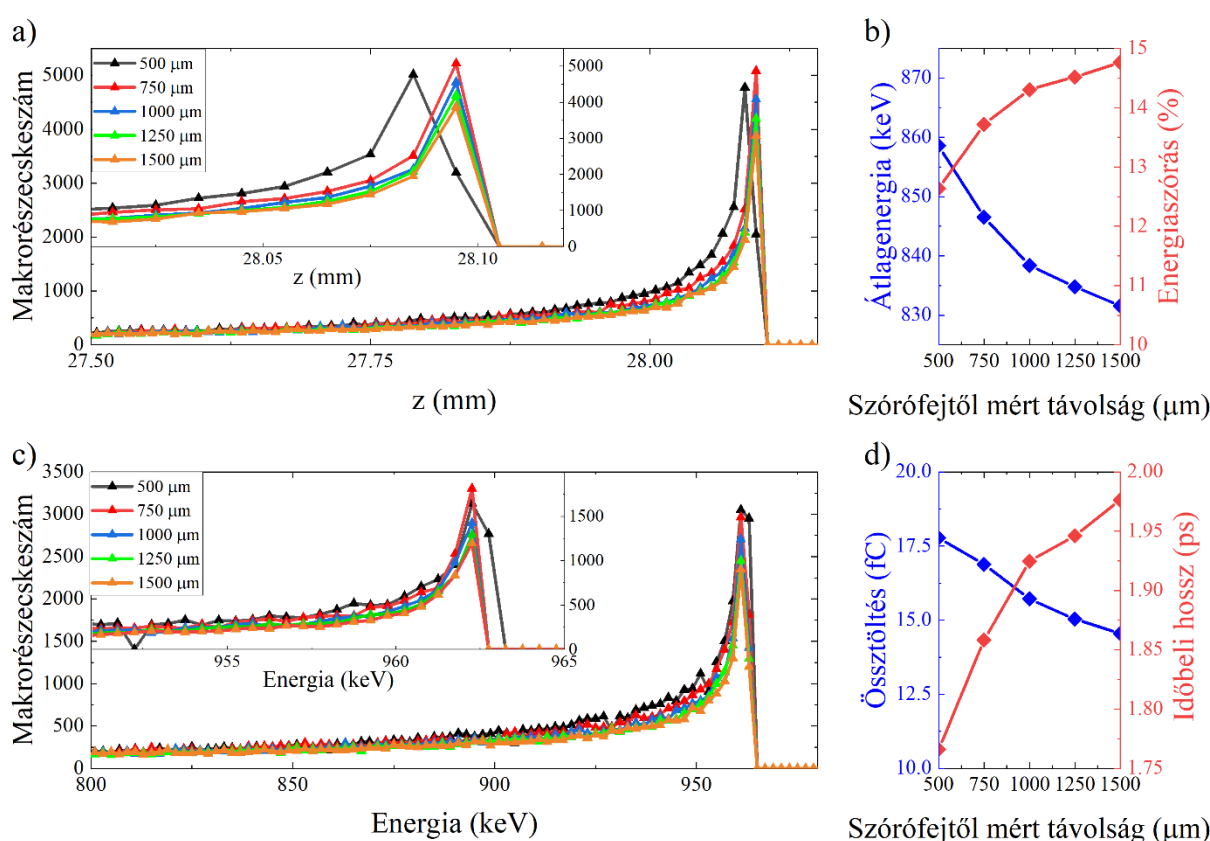
Csúcstérerősség [MV/cm]	Központi frekvenci [THz]	Impulzushossz (FWHM) [ps]	Impulzusenergia [mJ]
41,68	0,3	1,66	8

Az impulzusok a második fejezetben ismertetett Poisson-eloszlás alapján lettek definiálva (Porras-factor -1), egyenként 80 frekvenciakomponenssel. A szimulációba beimportáltam az ionizáció során keltett elektronok térbeli koordinátáit és keltési idejét. Ennek hatására a GPT szoftver az elektronokat az ionizáló lézernek megfelelően kelti időben és térben, melyek aztán a THz-es impulzusokkal való kölcsönhatásnak köszönhetően gyorsulni kezdenek. A gyorsítást 100 ps-ig vizsgáltam, mert ez idő alatt minden folyamat lejátszódik és a gyorsítás hatására az elektroncsomó olyan távolságokba ér, ahol már érdemes megvizsgálni felhasználhatóság szempontjából. Munkám során első lépésben optimalizáltam az elrendezést a gyorsított elektroncsomó átlagos energiájának maximalizálása érdekében a THz-es impulzusok időzítésének finomhangolásával. Az optimalizálást követően elvégeztem az öt különböző távolságban ionizált 20 fC-os elektroncsomó gyorsítását. A gyorsítást követően az elektroncsomó jellegzetes térbeli alakját a 17. ábra szemlélteti.



17. ábra. Egy gyorsított elektroncsomó jellegzetes alakja a z-y síkra levetítve.

Jól látszik, hogy az elektronok nagy része a csomó legelején helyezkedik el. Ez annak köszönhető, hogy a legtöbb elektron a gyorsító impulzusok fókuszpontjához közel helyezkedik el. A fókuszponttól távolabb eső elektronok kevesebb energiára tesznek szert a gyorsítás során, aminek következtében bizonyos mértékben lemaradnak. Ezen jelenség miatt tehát a gyorsított elektroncsomó jellemzésére végzett statisztikai számítások előtt érdemes levágni a gyorsított elektronok lemaradó részét, szem előtt tartva annak összetöltését. A statisztikai számításoknál azokat az elektronokat vettem figyelembe, amelyek legalább 540 keV energiával rendelkeznek. Ez az elektronok 75-90 %-át jelenti. A szórófejtől 5 különböző távolságra keltett elektroncsomó gyorsításának eredményeit a 18. ábra.



18. ábra. Az 5 különböző esetben keltett elektroncsomó gyorsításának szimulációját követően kapott a) gyorsítás irányába eső térbeli eloszlása és c) energiaspektrum. b) Az elektroncsomó átlagenergiája és szórása az ionizáció pozíciójának függvényében. d) Az elektroncsomó összetöltése és időbeli hossza (standard deviáció) a szórófejtől mért távolság függvényében.

Az a) és c) ábrán jól látszik, hogy a szórófejtől egyre távolabb elvégezve az ionizációt az elektroncsomók elején elhelyezkedő részecskék száma csökken, illetve kevesebb elektron közelíti meg a maximális energiát (~ 962 keV). Ez jól szemlélteti, hogy egyre nagyobb lesz a lemaradó (alacsonyabb energiával rendelkező) elektronok száma, ami a szélesebb kezdeti lokális sűrűségeloszlásnak köszönhető. Továbbá ezzel együtt csökken az elektroncsomó átlag

energiája (lásd b) grafikon) és a csomó össztöltése is (lásd d) ábra), ellenben nő a gyorsított elektroncsomó energia szórása (lásd b) grafikon) és a csomó időbeli hossza (STD) (lásd d) grafikon). Az eredmények alapján az látszik, hogy érdemes a szórófejhez a lehető legközelebb elvégezni az ionizációt, hiszen nem csak a csomó össztöltése lesz nagyobb, de térben is sokkal koncentráltabb lesz az elektroncsomó és nagyobb átlagenergiát érhetünk el, alacsonyabb energiaszórás érték mellett.

Az általam vizsgált eljárással tehát sikerült 15-18 fC össztöltésű relativisztikus elektroncsomókat 830-860 keV átlagenergiára gyorsítanom, 12-15 %-os energiaszórással, melyek időbeli hossza 1,75 – 2 ps között van.

IV. Összefoglaló

Munkám során tanulmányoztam a turbulens áramlások fizikáját. Kutatói munkám eredményességének bizonyításaképp sikeresen reprodukáltam a [26]-es kéziratban szereplő mérési eredményeket. Ezt követően megvizsgáltam több különböző kialakítású kripton-gázfúvókát és az általuk kialakított térbeli sűrűségeloszlást hosszirányban a tengely mentén, valamint transzverzálisan, a fúvóka szájától különböző távolságokra. Elemeztem, hogy milyen hatással van a sűrűségeloszlás alakulására, ha a szórófej szűkül vagy tágul, illetve, ha változtatom a szórófej hosszát, illetve a szórófej falának döntési szögét, ezáltal lefedve a legtöbb kísérleti megvalósítást. A kísérleti kivitelezést szem előtt tartva elmondható, hogy a leoptimálisabb választás egy táguló szórófej alkalmazása, ugyanis sokkal egyenletesebb sűrűségeloszlást lehet vele elérni, aminek köszönhetően kevésbé fogja befolyásolni az ionizáció során keletkező elektronfelhő töltéseloszlását. Ellenben ha nagyobb össztöltésű és rövidebb csomókat szeretnénk kapni érdekesebb lehet szűkülő szórófejet alkalmazni, mivel nagyobb sűrűség értékeket érhetünk el velük a szórófejtől ugyanakkora távolságban, viszont érzékenyebb lesz az elrendezés az ionizáció pozícionálására. A szórófej optimális hossza az általam vizsgált tartományban 1 mm-nek adódott, ugyanis a sűrűségeloszlás ekkor volt a legegényletesebb, mindezt rövidebb szórófejekhez képest nagyobb sűrűség értékek elérése mellett. A további számolásaimban egy 1 mm hosszú, 7°-os inverz szórófejjel számoltam. Meghatároztam a transzverzális sűrűségeloszlás paramétereit a szórófejtől 500, 750, 1000, 1250 és 1500 μm -re. Ezen paraméterekkel definiáltam a gázsugarat az ionizációs szoftverben és elvégeztem a kripton ionizálását. Numerikus szimulációim segítségével sikeresen keltettem minden választott pozícióban egy 20 fC össztöltéssel rendelkező elektroncsomót és

meghatároztam a gyorsítás irányában értelmezett eloszlását. Az eredmények alapján jól látszik, hogy a keletkező elektroncsomó jellemző hossza (FWHM) a szórófejtől távolodva drasztikusan nő. Az ionizáció vizsgálatát követően, a kutatásom során elvégeztem a keletkezett elektroncsomók gyorsításának numerikus szimulációit. Erre a célra két egymással szemben haladó, egyforma, extrém nagy energiájú THz-es impulzust tételeztem fel, melyek csúcs térerőssége 41,68 MV/cm. Először optimalizáltam a gyorsító elrendezést a gyorsított elektroncsomó átlagos energiájának maximalizálása érdekében. Végül pedig elvégeztem az ionizálással keltett elektroncsomók gyorsítását, melynek következtében sikeresen megjósoltam relativisztikus elektroncsomókat 830-860 keV átlagos energiával és 1,75 – 2 ps-os időbeli hosszal. Az ilyen elektroncsomók alkalmasak lehetnek utógyorsításra, így akár nagyobb részecskegyorsító berendezések forrásaként is szolgálhatnak, továbbá alkalmazhatóak különböző anyagok szerkezeti elemzésére vagy kémiai folyamatok vizsgálatára is.

Köszönetnyilvánítás

A TDK dolgozat az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-23-2-I-PTE-2020 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Irodalom jegyzék

- [1] F. X. Kärtner, "High-Energy THz Pulses for Electron Acceleration," in *2018 IEEE Photonics Conference (IPC)*, 30 Sept.-4 Oct. 2018, pp. 1-2, doi: 10.1109/IPCon.2018.8527154.
- [2] F. X. Kärtner, "High-Energy THz Generation and Electron Acceleration," in *High-Brightness Sources and Light-driven Interactions*, Strasbourg, 2018/03/26 2018: Optica Publishing Group, in OSA Technical Digest (online), p. MW3C.1, doi: 10.1364/MICS.2018.MW3C.1. [Online]. Available: <http://opg.optica.org/abstract.cfm?URI=MICS-2018-MW3C.1>
- [3] A. Sharma, Z. Tibai, and J. Hebling, "Intense tera-hertz laser driven proton acceleration in plasmas," *Physics of Plasmas*, vol. 23, no. 6, p. 063111, 2016, doi: 10.1063/1.4953803.
- [4] J. Hebling, G. Almási, I. Z. Kozma, and J. Kuhl, "Velocity matching by pulse front tilting for large-area THz-pulse generation," *Optics Express*, vol. 10, no. 21, pp. 1161-1166, 2002/10/21 2002, doi: 10.1364/OE.10.001161.
- [5] J. Hebling, K.-L. Yeh, M. C. Hoffmann, B. Bartal, and K. A. Nelson, "Generation of high-power terahertz pulses by tilted-pulse-front excitation and their application possibilities," *Journal of the Optical Society of America B*, vol. 25, no. 7, pp. B6-B19, 2008/07/01 2008, doi: 10.1364/JOSAB.25.0000B6.
- [6] J. Hebling, J. Fülöp, M. Mechler, L. Pálfalvi, C. Tőke, and G. Almási, "Optical manipulation of relativistic electron beams using THz pulses," *arXiv preprint arXiv:1109.6852*, 2011.
- [7] P. Salén *et al.*, "Matter manipulation with extreme terahertz light: Progress in the enabling THz technology," *Physics reports*, vol. 836, pp. 1-74, 2019.
- [8] J. A. Fülöp, S. Tzortzakis, and T. Kampfrath, "Laser-driven strong-field terahertz sources," *Advanced Optical Materials*, vol. 8, no. 3, p. 1900681, 2020.
- [9] G. Tóth, L. Pálfalvi, S. Turnár, Z. Tibai, G. Almási, and J. Hebling, "Performance comparison of lithium-niobate-based extremely high-field single-cycle terahertz sources," *Chinese Optics Letters*, vol. 19, no. 11, p. 111902, 2021.
- [10] A. Fallahi, M. Fakhari, A. Yahaghi, M. Arrieta, and F. X. Kärtner, "Short electron bunch generation using single-cycle ultrafast electron guns," *Physical Review Accelerators and Beams*, vol. 19, no. 8, p. 081302, 2016.

- [11] E. A. Nanni *et al.*, "Terahertz-driven linear electron acceleration," *Nature communications*, vol. 6, no. 1, p. 8486, 2015.
- [12] W. R. Huang *et al.*, "Toward a terahertz-driven electron gun," *Scientific reports*, vol. 5, no. 1, p. 14899, 2015.
- [13] W. R. Huang *et al.*, "Terahertz-driven, all-optical electron gun," *Optica*, vol. 3, no. 11, pp. 1209-1212, 2016.
- [14] Z. Tibai *et al.*, "Relativistic electron acceleration by focused THz pulses," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 51, no. 13, p. 134004, 2018.
- [15] S. Turnár, J. Hebling, J. Fülöp, G. Tóth, G. Almási, and Z. Tibai, "Design of a THz-driven compact relativistic electron source," *Applied Physics B*, vol. 127, pp. 1-7, 2021.
- [16] J. Lu *et al.*, "Coherent two-dimensional terahertz magnetic resonance spectroscopy of collective spin waves," *Physical review letters*, vol. 118, no. 20, p. 207204, 2017.
- [17] S. Fleischer, Y. Zhou, R. W. Field, and K. A. Nelson, "Molecular orientation and alignment by intense single-cycle THz pulses," *Physical Review Letters*, vol. 107, no. 16, p. 163603, 2011.
- [18] T. Kampfrath, M. Wolf, and M. Sajadi, "The sign of the polarizability anisotropy of polar molecules is obtained from the terahertz Kerr effect," *Chemical Physics Letters*, vol. 692, pp. 319-323, 2018.
- [19] M. Usami, M. Yamashita, K. Fukushima, C. Otani, and K. Kawase, "Terahertz wideband spectroscopic imaging based on two-dimensional electro-optic sampling technique," *Applied Physics Letters*, vol. 86, no. 14, 2005.
- [20] J. F. Federici *et al.*, "THz imaging and sensing for security applications—explosives, weapons and drugs," *Semiconductor science and technology*, vol. 20, no. 7, p. S266, 2005.
- [21] H.-B. Liu, H. Zhong, N. Karpowicz, Y. Chen, and X.-C. Zhang, "Terahertz spectroscopy and imaging for defense and security applications," *Proceedings of the IEEE*, vol. 95, no. 8, pp. 1514-1527, 2007.
- [22] D. M. Leitner, M. Gruebele, and M. Havenith, "Solvation dynamics of biomolecules: modeling and terahertz experiments," *HFSP journal*, vol. 2, no. 6, pp. 314-323, 2008.
- [23] M. Heyden, E. Bründermann, U. Heugen, G. Niehues, D. Leitner, and M. Havenith, "Long-Range Influence of Carbohydrates on the Solvation Dynamics of Water□ Answers from Terahertz Absorption Measurements and Molecular Modeling Simulations," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 130, no. 17, pp. 5773-5779, 2008.

- [24] L. Pálfalvi, J. A. Fülöp, G. Tóth, and J. Hebling, "Evanescent-wave proton postaccelerator driven by intense THz pulse," *Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams*, vol. 17, no. 3, p. 031301, 2014.
- [25] S. Turnár, B. Sarkadi, S. W. Jolly, J. Hebling, and Z. Tibai, "Numerical investigation of terahertz wave driven electron acceleration generated from gas jet," *Applied Physics B*, vol. 130, no. 2, p. 24, 2024/01/08 2024, doi: 10.1007/s00340-023-08157-x.
- [26] J. Holburg, M. Müller, and K. Mann, "Improved gas-jet based extreme ultraviolet, soft X-ray laser plasma source," *Optics Express*, vol. 29, no. 5, pp. 6620-6628, 2021.
- [27] D. C. Wilcox, *Turbulence modeling for CFD*. DCW industries La Canada, CA, 1998.
- [28] M. Dibon *et al.*, "Spring-driven high speed valve for massive gas injection in tokamaks," *Review of Scientific Instruments*, vol. 88, no. 3, 2017.
- [29] A. Lawrence-Douglas, "Ionisation effects for laser-plasma interactions by particle-in-cell code," University of Warwick, 2013.
- [30] A. O'Neill and G. Sarri, "Laser Wakefield Accelerator Simulations Using EPOCH," *Queen's University, Belfast, United Kingdom*, 2017.
- [31] M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, "Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field," *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 64, no. 6, p. 1191, 1986.
- [32] K. Bennett *et al.*, "Users manual for the EPOCH PIC codes," *University of Warwick*, 2017.
- [33] S. Van Der Geer, O. Luiten, M. De Loos, G. Pöplau, and U. Van Rienen, "3D space-charge model for GPT simulations of high brightness electron bunches," in *Institute of Physics Conference Series*, 2005, vol. 175, p. 101.
- [34] M. De Loos and S. Van der Geer, "General Particle Tracer: A new 3D code for accelerator and beamline design," in *5th European Particle Accelerator Conference*, 1996, p. 1241.
- [35] Z. Tibai, S. Turnár, G. Tóth, J. Hebling, and S. W. Jolly, "Spatiotemporal modeling of direct acceleration with high-field terahertz pulses," *Optics Express*, vol. 30, no. 18, pp. 32861-32870, 2022.
- [36] F. R. Menter, "Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications," *AIAA journal*, vol. 32, no. 8, pp. 1598-1605, 1994.
- [37] W. Sutherland, "LII. The viscosity of gases and molecular force," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 36, no. 223, pp. 507-531, 1893.