

Untersuchungen zu einem Freie-Elektronen-Laser-Oszillator im Röntgen-Wellenlängenbereich für den European XFEL

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Departments Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von
Johann Christian Uwe Zemella
aus Hamburg

Hamburg,
2013

Gutachter der Dissertation: Prof. Dr. Jörg Roßbach
Prof. Dr. Edgar Weckert

Gutachter der Disputation: Prof. Dr. Jörg Roßbach
Dr. Jens Osterhoff

Datum der Disputation:

Vorsitzender des Prüfungsausschusses: Prof. Dr. Wolfgang Hansen

Vorsitzender des Promotionsausschusses: Prof. Dr. Peter Hauschildt

Dekan der Fakultät für Mathematik,
Informatik und Naturwissenschaften: Prof. Dr. Heinrich Graener

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe, dass alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus anderen Quellen übernommen wurden, als solche kenntlich gemacht sind und dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegt wurde.

Hamburg, den 1. April 2013

Zusammenfassung

In der hier vorliegenden Arbeit wird ein Freie-Elektronen-Laser-Oszillator im Spektralbereich des Röntgenlichts (XFELO) für den European XFEL vorgestellt. Eine Oszillatoranordnung besteht aus mindestens zwei BRAGG-beugenden Kristallen, hier aus Diamant und einem Undulator. Diamant hat den Vorteil einer sehr hohen Reflektivität und die höchste der bekannten Wärmeleitfähigkeit, die auch notwendig ist, damit die absorbierte Energie der Photonenpulse schnell abgeführt werden kann. Im Rahmen dieser Arbeit wird der prinzipielle Aufbau eines XFELs für den European XFEL und der Verstärkungsprozess eines XFELs getrieben mit Elektronenpaketen des European XFELs beschrieben. Auswirkungen auf den FEL-Prozess im Hinblick auf Störungen und Abweichungen vom Soll werden untersucht. Des Weiteren wird die Temperaturentwicklung in den Kristallen diskutiert. Eine Erweiterung der XFELO-Berechnung unter Berücksichtigung der Erwärmung der Kristalle wird vorgestellt. Ein experimenteller Aufbau ist geplant und umgesetzt worden und wird hier beschrieben. Der experimentelle Aufbau dient der Untersuchung der Temperaturentwicklung der Kristalle unter simulierten XFELO-Bedingungen.

Abstract

In this thesis an X-ray free electron laser oscillator for the European XFEL is described. Such an oscillator consists of at least two BRAGG deflecting crystals, in this content two or four Diamond crystals, a focussing mirror and an undulator. The advantage of Diamond is caused by the high reflectivity and the high thermal conductivity, which is necessary for dissipate the absorbed energy out of the center of the crystal. In context of this thesis the principle layout of an XFELO for the European XFEL and the FEL process will be presented. Effects on the FEL process due to the disturbances of the electron beam or the XFELO cavity are discussed. As second aspect the thermal evolution in the crystal under absorbed XFELO-pulses is investigated. An experiment for the investigation of the thermal evolution of crystals under simulated XFELO conditions is presented.

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung	1
2. Grundlagen von Freie Elektronen Lasern	3
2.1. FEL-Verstärker	4
2.2. SASE-FEL	5
2.3. FEL-Oszillator	6
2.4. Kurzwellige FELs mit erhöhter zeitlicher Kohärenz	7
2.5. Undulatorstrahlung	8
2.6. FEL-Theorie	11
2.6.1. Schwach verstärkender FEL	12
2.6.2. Stark verstärkender FEL	14
2.7. Eigenschaften der FEL-Strahlung	19
3. Grundlagen zur Röntgenlicht-Beugung	23
3.1. Bragg-Gesetz	23
3.1.1. Änderung der Bragg-Wellenlänge mit der Temperatur	24
3.2. Dynamische Theorie der Röntgenbeugung an Kristallen	25
3.2.1. Allgemeine Lösung des Gleichungssystems für zwei Strahlen	25
3.2.2. Korrektur für das Bragg-Gesetz	28
3.3. Lösung für Diamant-Kristalle	29
3.4. Absorption und Eindringtiefe	30
4. Grundlagen zur Temperaturentwicklung in Festkörpern	33
4.1. Einführung	33
4.2. Analytische Beschreibung des Wärmetransports	35
4.2.1. Gauss-förmige Temperaturverteilung	35
4.2.2. Lösung der Wärmeleitungsgleichung	36
4.3. Numerische Lösung des Wärmetransports	38
4.3.1. Gitter	38
4.3.2. Initiales Temperaturfeld	38
4.3.3. Temperaturdifferenzen pro Zeiteinheit	40
4.3.4. Randbedingungen	41
4.3.5. Iterationsschleife	41
5. XFEL-Konfigurationen	43
5.1. Beschreibung der Resonatoren mit ABCD-Formalismus	43
5.1.1. Zwei gekrümmte Bragg-Kristalle	44
5.1.2. Zwei Bragg-Kristalle und ein fokussierender Spiegel	44

5.1.3. Zwei Bragg-Kristalle und zwei fokussierende Spiegel	45
5.1.4. Vier Bragg-Kristalle und zwei fokussierende Spiegel	47
5.2. Auskopplung der Photonen	49
5.3. Einkopplung des Elektronenstrahls in den Resonator	51
6. Numerische Simulation des FEL-Prozesses	55
6.1. Numerische Simulation eines FEL-Oszillators	55
6.1.1. FEL-Simulations-Programme	56
6.1.2. Propagation eines elektromagnetischen Feldes	57
6.2. Numerische Simulationen eines XFELs bei 1 Å	60
6.2.1. 75 fs langer SASE-typischer Elektronenpuls des European XFELs	61
6.2.2. XFEL unter Berücksichtigung von Wärmelasteffekten am Bragg-Kristall	65
6.2.3. Elektronenpuls mit 100 pC Ladung	71
6.3. Unterschiedliche Wellenlängen	74
6.4. Einflüsse auf die Verstärkung bei einem XFEL	76
6.4.1. Lineare longitudinale Energiekorrelation	76
6.4.2. Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung	76
6.4.3. Puls-zu-Puls Energiefehler der Elektronenpakete	77
6.4.4. Winkelfehlstellung des ersten Kristalls	78
6.4.5. Elektronenstrahl mit transversalem Versatz zur Undulatorachse	79
6.4.6. Elektronenstrahl mit Winkel zur Undulatorachse	79
6.4.7. Oberflächenfehler am fokussierenden Spiegel im streifenden Einfall	80
7. Numerische Simulation der Wärmelast auf Kristallen	83
7.1. Temperaturentwicklung in Diamantkristallen	85
7.1.1. Einfluss des Undulatorstrahlungsuntergrundes	87
7.2. Temperaturverteilung mit 10 ns langen Pulsen	89
8. Experimenteller Aufbau zur Bestimmung der Wärmelastgrenzen der Bragg-Reflexion	95
8.1. Strahlfläche C am DORIS	95
8.2. Aufbau im Experimentiergebiet C am DORIS	96
8.2.1. Ausrichtung der Kristalle	97
8.2.2. Wasserkühlung für Silizium-Kristalle	98
8.2.3. Kryogenisch gekühlter Kristallhalter	101
8.2.4. Laserheizung	104
8.2.5. Propagation des Laserlichts zum Bragg-Kristall	107
8.3. Messmethoden	107
8.3.1. Reflektive Messung	108
8.3.2. Transmittive Messung	109
9. Zusammenfassung	113
A. European XFEL	117
A.1. Injektor	117
A.2. Linearbeschleuniger	117

A.3. Strahl-Verteilungssystem	118
A.4. Undulatoren	119
A.5. Photonstrahlführungen	119
A.6. Instrumentation und Experimentierhalle	121
B. Betafunktion	123
C. XFELO Simulationen	125
C.1. ERL-typischer Elektronenpuls	125
D. Thermische Simulationen	129
D.1. Thermische Eigenschaften von Diamant und Silizium	129
D.2. Thermische Simulationen eines Diamantkristalls	129
E. Simulation des Experiments	137
Glossar	143
Akronyme	145
Symbolverzeichnis	147
Literaturverzeichnis	155

1. Einführung

Die elektromagnetische Wechselwirkung ist die Wechselwirkung, welche für uns neben der Gravitation am deutlichsten sichtbar ist. Lichtquanten, die Wechselwirkungsteilchen der elektromagnetischen Wechselwirkung, tragen die Informationen über die Systeme mit denen sie interagieren. Durch die Erzeugung von Licht mit speziellen Eigenschaften ist es möglich geworden, Materialeigenschaften genauer zu untersuchen. Die Eigenschaften der Strahlung, erzeugt durch einen LASER, haben sich als ein äußerst nützliches experimentelles Werkzeug erwiesen, da diese sehr reine Zustände von Licht erzeugen können, wie z.B. kohärentes Licht, sehr schmalbandiges Licht oder gepulstes Licht mit kurzen Pulsdauern (< 10 fs). Herkömmliche Laser, basierend auf Anregung von Elektronen in ein metastabiles Elektronenniveau in Kristallen, Gasen oder Farbstoffen, sind in der Erzeugung von kurzwelligem Lichtquanten (< 1 nm) begrenzt, da die Lebensdauer der entsprechenden Laserniveaus sehr kurz ist (< 1 ps) (SUCKEWER *et al.*, 1990).

Mit Röntgenlicht (RÖNTGEN, 1896) ist es möglich, Strukturen mit dem Atomabstand in Molekülen oder Festkörpern (wenige Angström) aufzulösen oder physikalische Systeme anzuregen (z.B. K-Schalen). Durch gepulstes Licht können zeitabhängige Prozesse studiert werden. Je kürzer die Pulse sind, desto höher ist die erreichbare Zeitauflösung der Messung. Hochintensives Licht bietet die Möglichkeit, extreme Materiezustände zu erzeugen wie sie in unserer Umwelt nicht vorkommen aber in Sternen oder massereichen Planeten (VINKO *et al.*, 2012). Inelastische Effekte lassen sich genauer untersuchen, indem die Unschärfe der Anregung minimiert wird, in diesem Fall die Anzahl der Frequenzkomponenten des Lichts. Um effizient hochintensive und schmalbandige Röntgenlichtpulse zu erzeugen, haben sich Elektronenbeschleuniger bewährt. Früher als ein ungewollter Nebeneffekt betrachtet, ist die Synchrotronstrahlung eine wichtige Lichtquelle für die Untersuchung physikalischer, biologischer, medizinischer und materialwissenschaftlicher Systeme geworden, für dessen Erzeugung eigenständige Großanlagen gebaut werden (LIGHTSOURCES.ORG, 2012).

Licht aus Elektronenspeicherringen haben einen hohen mittleren Photonenfluss im Spektralbereich von Röntgenlicht, sind aber aufgrund der Länge der Elektronenpakete im Spitzenfluss der Photonen begrenzt. Außerdem ist die spektrale Bandbreite der emittierten Photonen durch die Länge des Undulators gegeben. Diese kann zwar nahezu beliebig durch Monochromatoren verbessert werden, was aber eine Reduzierung des Photonenflusses zur Folge hat. Für die Erzeugung des brilliantesten Röntgenlichts (Einheit der Brillanz siehe Seite 154) werden Linearbeschleuniger gebaut, mit denen ein **Free Electron Laser** (FEL) betrieben wird (EMMA *et al.*, 2010; ARTHUR *et al.*, 2002; TANAKA *et al.*, 2005). Am Standort **Deutsches Elektron Synchrotron** (DESY) wird der FEL „European XFEL“, der Wellenlängen kleiner als 1 Angström erzeugen kann, erbaut. Die Verstärkung der Lichtpulse beruht auf dem **Self Amplified Spontaneous Emission** (SASE)-Prozess. Die Wechselwirkung der spontanen Undulatorstrahlung des Elektronenpakets mit dem Elektronenpaket in einem periodischen alternierenden Magnetfeld führt zu einer Modulation der Elektronendichte des Elektronenpakets. Dieses führt zu einer kohären-

ten Abstrahlung von Licht. Die kohärente Abstrahlung bewirkt eine starke Zunahme der Anzahl der abgestrahlten Photonen pro Zeit. Die Kohärenzeigenschaften des abgestrahlten Lichts sind für die unterschiedlichen FEL-Klassen unterschiedlich.

Das Spektrum des Lichts eines SASE-Pulses ist dem intrinsischen Rauschen des Elektronenpakets unterworfen und besitzt viele unterschiedliche longitudinale Moden, die sich von Elektronenpakets zu Elektronenpakets unterscheiden (SALDIN *et al.*, 2000). Diese Fluktuationen können durch einen wohl definierten initialen Lichtpuls, der verstärkt wird, unterdrückt werden („seeding“) (SALDIN *et al.*, 2000). Für Angström-Wellenlängen ist der initiale Lichtpuls ein gefilterter Strahlungspuls aus einem voran gestellten FEL. Diese „self-seeding“ genannten Experimente benötigen eine längere Undulatorstrecke als der SASE-Undulator, da die Intensität des Lichtpulses vom ersten Undulatorabschnitt durch das Filtern des Spektrums verringert wird (SALDIN *et al.*, 2001).

Ein weiterer FEL ist der „schwach verstärkende“ FEL (MADEY, 1979). Dieser FEL besteht aus einem Resonator, in dem ein Undulator als Verstärker der Lichtpulse steht. Die Undulatorstrahlung wird über viele Resonatorumläufe verstärkt. Bestehende Anlagen arbeiten bereits über einen weiten Wellenlängenbereich von 10 mm bis 180 nm (RAMIAN, 1992; MARS *et al.*, 2002). Für Röntgenstrahlung ist der Aufbau eines Resonators mit herkömmlichen metallischen Spiegeln nicht möglich, da die Plasmafrequenz kleiner ist als die Frequenz des Lichts (vgl. JACKSON, 1966, S. 227). Ein Resonator für Röntgenstrahlung wurde schon vor Jahrzehnten (COTTERILL, 1968; COLELLA *et al.*, 1984) vorgeschlagen und nutzt die Beugung von Röntgenlicht an den Netzebenen von Kristallen, die BRAGG-Beugung (BRAGG *et al.*, 1913; AUTHIER, 2001). Vor ein paar Jahren wurde die Idee neu aufgegriffen, um einen **X-Ray Free Electron Laser Oscillator** (XFEL) für einen **Energy Recovery Linac** (ERL) zu realisieren (KIM *et al.*, 2008). Bei dieser Art von Elektronenbeschleunigern kann so die Brillanz stark erhöht werden. Im Gegensatz zu den SASE-Pulsen sind die XFEL-Pulse nahezu FOURIER-limitiert.

Der auf supraleitenden Beschleunigerstrukturen basierende European XFEL lässt es aufgrund der Zeitstruktur der Elektronenpakete und der Eigenschaften der Elektronenpakete zu, einen XFEL zu betreiben.

Im Rahmen dieser Arbeit wird der Verstärkungsprozess eines XFELs für verschiedenen Ladungen und Wellenlängen näher untersucht. Die Wärmeentwicklung in den BRAGG-Kristallen, die nötig sind, um den Resonator aufzubauen, wird analytisch und numerisch berechnet und es wird ein Experiment beschrieben, mit dem die erwartbare Wärmelast auf den Kristallen simuliert werden kann.

Zunächst werden die Grundlagen zur FEL- und BRAGG-Theorie erörtert, gefolgt von der Beschreibung des Wärmeflusses in Festkörpern. Es folgt eine Einführung zum European XFEL. Verschiedene Spiegelkonfigurationen für den Resonator eines XFELs am European XFEL werden vorgestellt im Hinblick auf die Durchstimmbarkeit und die Anforderung an die Winkelstabilität der Aufstellung der Spiegel. Anschließend werden numerische Berechnungen zur Verstärkung des Lichts im Resonator und der Wärmeentwicklung in den Kristallen diskutiert. Der letzte Abschnitt befasst sich mit dem experimentellen Aufbau und den ersten Messungen, die mit dem Experiment durchgeführt worden sind.

2. Grundlagen von Freie Elektronen Lasern

Ein Freie-Elektronen-Laser (FEL) ist ein Oberbegriff für eine Klasse von beschleunigerbasierten Lichtquellen, bei der Elektronen kohärent elektromagnetische Wellen abstrahlen. Die kohärent abgestrahlte Leistung nimmt bezüglich der Anzahl der Elektronen quadratisch zu, im Gegensatz zur linearen Abhängigkeit bei inkohärenter Abstrahlung. Zu unterscheiden sind dabei „schwach“ verstärkende FELs (MADEY, 1979) und „stark“ verstärkende FELs (KONDRATENKO *et al.*, 1980; BONIFACIO *et al.*, 1984). Die Begrifflichkeit „stark“ bzw. „schwach“ bezieht sich dabei auf die Änderung des elektromagnetischen Feldes beim Durchgang durch den Undulator. Ist die Zunahme der Amplitude klein gegenüber der Eingangsamplitude des elektromagnetischen Feldes wird von einem „schwach“ verstärkende FEL gesprochen (siehe Abschnitt 2.6.1). Ist die Änderung der Amplitude beim Durchgang durch den Undulator so groß, dass die Änderung der Amplitude entlang des Undulators berücksichtigt werden muss, wird von einem „stark“ verstärkenden FEL gesprochen (siehe Abschnitt 2.6.2). Drei Klassen von FELs werden unterschieden:

- FEL-Verstärker
- SASE-FEL
- FEL-Oszillator

um den Verstärkungsprozess grundsätzlich einzuordnen. Der Verstärkungsmechanismus eines FEL-Verstärkers bildet die Grundlage für alle FELs, der Verstärkung eines elektromagnetischen Feldes in einem Undulator durch ein Elektronenpaket. FEL-Verstärker-Experimente für kurze Wellenlängen werden im „stark“-verstärkenden Regime betrieben. Ein SASE-FEL ist ein FEL-Verstärker mit der Besonderheit, dass dieser das initiale Lichtfeld selbst erzeugt. Der FEL-Oszillator wird grundsätzlich im „schwach“-verstärkenden Regime betrieben. Im Gegensatz zu einem SASE-FEL oder Verstärker-Experimenten, bei dem Sättigung der Amplitude des elektromagnetischen Feldes innerhalb eines Undulatordurchlaufs erreicht wird, werden für das Erreichen der Sättigung beim XFEL viele Undulatordurchgänge von Elektronpaketen und Photonpuls benötigt. Das erfordert eine optische Anordnung, die das elektromagnetische Feld wieder zum Undulatoranfang bringt und kontinuierlich aufeinander folgende Elektronenpakete.

Im folgenden Abschnitt werden unterschiedliche FEL-Konfigurationen näher beschrieben. Zunächst wird eine phänomenologische Einführung zu FELs gegeben und anschließend eine mathematische Beschreibung. Die mathematischen Grundlagen sind gegliedert in Undulatorstrahlung, die Wechselwirkung eines elektromagnetischen Feldes mit einem Elektronpaket in Anwesenheit eines periodischen Magnetfeldes und die eindimensionale Theorie von „schwach“ und „stark“ verstärkenden FELs diskutiert. Anschließend werden die Eigenschaften der erzeugten Lichtpulse.

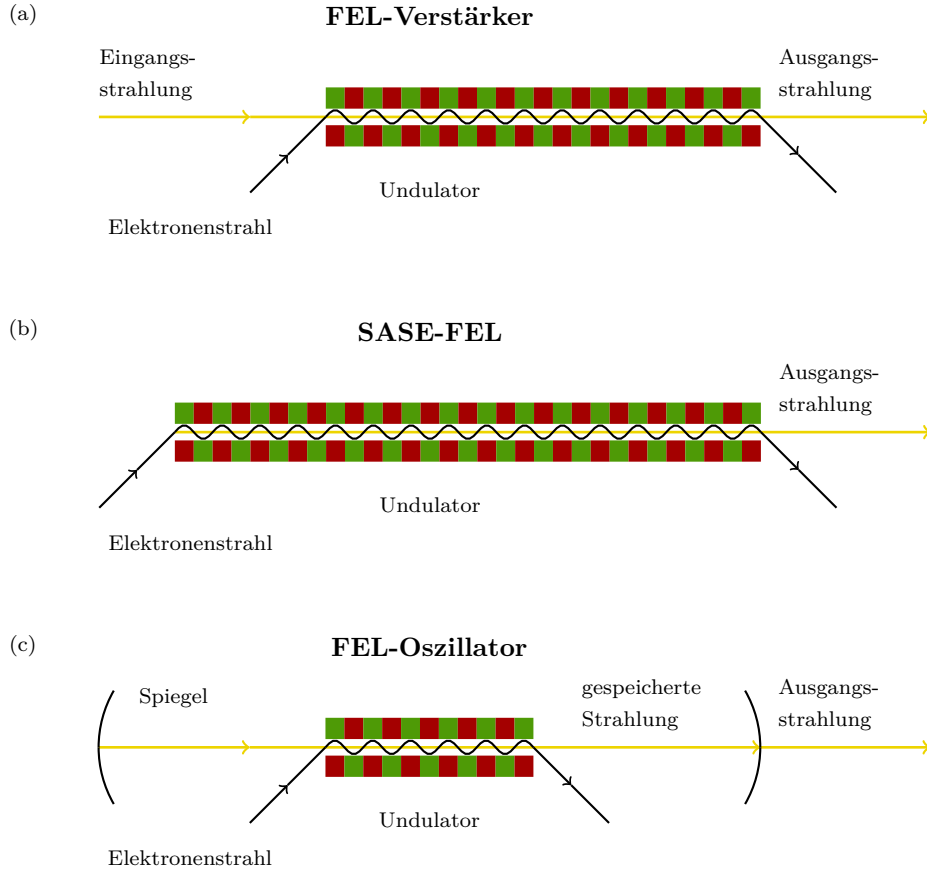


Abbildung 2.1.: Schematische Darstellung unterschiedlicher FEL-Klassen.

2.1. FEL-Verstärker

FEL-Verstärker verstärken die Amplitude eines elektromagnetischen Feldes durch einen Energieübertrag von Elektronen auf das elektromagnetische Feld (siehe Abb. 2.1a). Für den Energieübertrag ist eine transversale Geschwindigkeitskomponente erforderlich. Die transversale Geschwindigkeitskomponente wird durch den Einsatz eines Undulators, einer periodischen Magnetanordnung aus alternierenden Dipolen erreicht. Voraussetzung für eine Wechselwirkung zwischen dem Elektronenpaket und dem Lichtpuls ist eine Überlagerung transversal in Ort und Winkel sowie longitudinal in einem Undulator. Darüber hinaus muss die Wellenlänge der Eingangsstrahlung innerhalb der Bandbreite der FEL-Verstärkung liegen. Die Stärke der Wechselwirkung ist stark von der Elektronendichte und dem elektrischen Feld abhängig, sodass für „stark“-verstärkende FELs, die bei kurzen Wellen abstrahlen (PELLEGRINI, 2012, $\lambda_{\text{Rad}} < 50 \text{ nm}$), eine kleine Strahlemittanz, ein hoher Spitzenstrom und eine geringe Standardabweichung σ_{E_B} von Energieverteilung der Elektronen von der Sollenergie E_B nötig sind, was besondere Anforderungen an den Elektronenbeschleuniger stellt (vgl. S. 16). Diese hohen Elektronendichten können aufgrund von Strahlinstabilitäten nicht in Elektronenspeicherringen

erzeugt werden (WILLE, 1996, S.127). Außerdem weisen Kreisbeschleuniger aufgrund eines Gleichgewichtszustand zwischen Synchrotronstrahlung und Quantenfluktuationen im Elektronenpaket eine höhere Standardabweichung der Energieverteilung der Elektronen auf, sodass für diese Klasse von FELs für kurze Wellenlängen lineare Elektronenbeschleuniger entwickelt werden (WINICK, 1995; ALTARELLI *et al.*, 2007; EDWARDS, 1995).

Die Verstärkung in einem FEL erfolgt durch eine Umordnung der Elektronen im Elektronenpaket in longitudinale Scheiben höherer Elektronendichte und niedrigerer Elektronendichte, dessen Abstand die Wellenlänge des FEL-Strahlung ist. Diese Umordnung der Elektronen wird hervorgerufen durch die Wechselwirkung des Lichtfeldes mit den Elektronen und der Wechselwirkung des elektrischen Feldes des Elektronenpakets selbst im Magnetfeld des Undulators. Am Beginn des Verstärkungsprozesses erhält ein Teil der Elektronen Energie vom elektromagnetischen Feld und der andere Teil gibt Energie an das elektromagnetischen Feld ab. Da die Länge der Trajektorien der Elektronen im Undulator von der Energie der Elektronen abhängt, ordnen sich die Elektronen zu einem modulierten Paket um. Die Elektronen mit Resonanzenergie γ_r bleiben genau eine Wellenlänge pro Undulatorperiode zurück. Die Bewegung der Elektronen und das abgestrahlte elektromagnetische Feld der Ladungsverteilung werden durch ein System aus gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung beschrieben. Diese periodische Dichtemodulation der Elektronen führt zu einem kohärenten Abstrahlen und der quadratischen Steigerung der abgestrahlten Leistung, da sich die abgestrahlten elektromagnetischen Wellen der einzelnen Elektronen konstruktiv überlagern.

Die transversale Kohärenz der Strahlung kann durch die unterschiedlichen Verstärkungen der transversalen elektromagnetischen Moden (TEM) erklärt werden. Die Grundmode TEM₀₀ wechselwirkt am stärksten mit dem Elektronpaket, da dessen Überlapp mit dem Elektronenpaket entlang des Undulators am größten ist (DOHLUS *et al.*, 2008, S.118). Somit erfährt diese Mode die größte Verstärkung. Ein Maß für die transversale Kohärenz ist der Kohärenzradius.

Die longitudinale oder zeitliche Kohärenz wird durch den Geschwindigkeitsunterschied der Elektronen und der Photonen erzeugt. Das Elektron muss innerhalb einer Undulatorperiode eine Wellenlänge zurückfallen. Dadurch wird ein Wellenzug mit der Anzahl der Undulatorperioden innerhalb einer Verstärkungslänge erzeugt. Ist das Elektronenpaket länger als der erzeugte Pulszug, müssen die Wellenzüge von „außen“ dazu gebracht werden, phasengleich abzustrahlen. Dies ist in einem FEL-Verstärker mit einem zeitlich kohärenten initialen Lichtpuls im Gegensatz zu einem SASE-FEL der Fall.

2.2. SASE-FEL

Ein SASE-FEL beschreibt einen FEL, bei dem die spontane Undulatorstrahlung im Verlauf des Undulators verstärkt wird. Da der verstärkte Lichtpuls von dem Elektronenpaket selbst erzeugt wird, unterliegt dieser „initiale“ Lichtpuls (Undulatorstrahlung) dem Schrotrauschen des Elektronenpakets (DOHLUS *et al.*, 2008, S.112). Ein Vorteil dieses Typs von FEL ist die stets maximale Verstärkung, da das Spektrum der spontanen Undulatorstrahlung anfangs viel breiter ist als die Bandbreite der FEL-Verstärkung. Außerdem ist die Durchstimmbarkeit der abgestrahlten Wellenlänge groß. Ein Beispiel hierfür ist der SASE2 Undulator des European XFELs, dessen abgestrahlte Wellenlänge um 400 % geändert werden kann (Tab. A.2) oder der

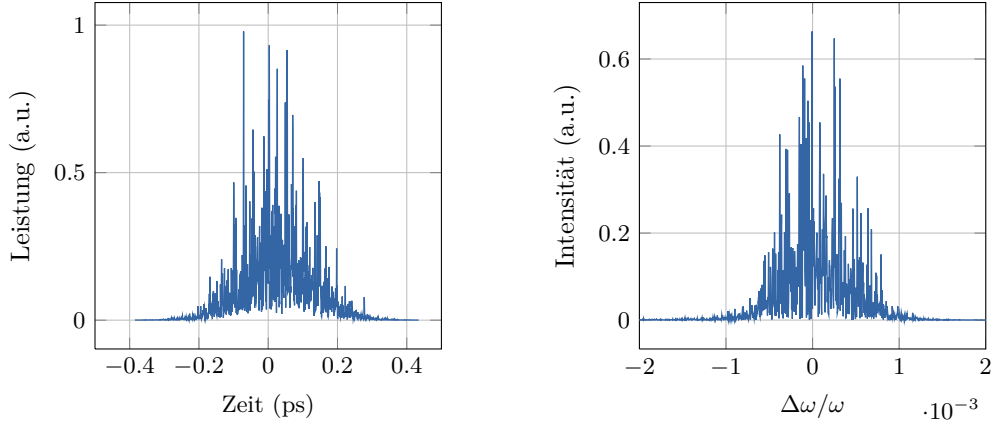


Abbildung 2.2.: Links: Leistung in Abhängigkeit von der Zeit eines SASE-Lichtpulses. Rechts: Leistung in Abhängigkeit von der Frequenz eines SASE-Lichtpulses.

Free Elektron-Laser in Hamburg (FLASH), dessen Wellenlänge um mehr als eine Größenordnung durchgestimmt werden kann (SCHREIBER *et al.*, 2009, 2010).

Gleichzeitig ist die Initiierung des SASE-Prozesses aus dem Rauschen des Elektronenpakets ein entscheidender Nachteil dieser Technik, da die Eigenschaften der Lichtpulse durch die spontane Undulatorstrahlung gegeben sind, die stochastischen Fluktuationen der Elektronenpositionen im Paket unterliegen. Das führt zu einem Puls aus vielen Wellenpaketen (longitudinale Moden, siehe Abb. 2.2). Die Kohärenzzeit, also der zeitliche Abstand zweier abgestrahlter elektromagnetischer Wellen im Elektronenpaket in denen eine feste Phasenbeziehung existiert, ist für einen SASE-FEL in der Regel erheblich kürzer als die Länge des Strahlungspulses. Das führt zu vielen unabhängigen Moden innerhalb des Photonpulses. Die Anzahl der Moden in einem Strahlungspuls ist gegeben durch das Verhältnis der Länge des Strahlungspulses und der Kohärenzzeit. Wird ein SASE-Puls spektral monochromatisiert, so fluktuiert die Intensität im linearen Verstärkungsregime von Puls-zu-Puls mit einer Varianz, die durch die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Gammadistribution $\Gamma(M)$ gegeben ist (DOHLUS *et al.*, 2008, S.199), wobei M die Anzahl der longitudinalen Moden ist. Ist die Linienbreite des Filters gleich der Linienbreite einer longitudinalen Mode, fluktuiert die Intensität mit der Varianz von $\sigma^2 = 1$ (DOHLUS *et al.*, 2008, S. 114f). Sollte die Bandbreite eines SASE-Pulses auf die Bandbreite eines XFELs verringert werden, würde die Puls-zu-Puls Fluktuation entsprechend eins sein. Erst wenn die Elektronenpaketlänge kleiner oder zumindest gleich der Kohärenzzeit ist, wird nur eine longitudinale Mode verstärkt. Die Länge der Elektronenpakete kleinerer Ladungspakete $q \approx 20$ pC bleibt wesentlich größer als die Kohärenzzeit für FELs im Röntgenbereich (GELONI *et al.*, 2010b, $\tau_{\text{Koh}} \approx 0.2$ fs).

2.3. FEL-Oszillator

Ein FEL-Oszillator (FELO) besteht aus einem Undulator, der von einer Spiegelanordnung umgeben ist (siehe Abb. 2.1c). Das Licht der spontanen Undulatorstrahlung wird zum Anfang des Undulators zurück geleitet und dort mit einem nachfolgenden Elektronenpaket zum Überlapp

gebracht. Der FEL-Oszillator wird im „schwach“-verstärkenden Regime betrieben. Die Verstärkung des FELs ist, verglichen mit der Verstärkung eines SASE-FELs oder einem „seeding“-Experiment, klein. Die maximale Verstärkung eines FELOs ist etwas oberhalb der Resonanzenergie γ_{rel} . Nur dann wird ein Nettoenergieübertrag auf das Lichtfeld erzielt. Dieses wird durch das MADEY-Theorem beschrieben (MADEY, 1979). Durch die ständige Akkumulation des Lichtfeldes von einem Undulatordurchlauf zum nächsten wird die Intensität des Lichtfeldes bis zu einem Gleichgewichtszustand erhöht. Die Verluste im Resonator (Auskopplung und Absorption der optischen Komponenten) müssen dabei geringer sein als die Verstärkung des FELs. Die Verstärkung kann mit der von MADEY (1979) eingeführten Verstärkung eines Lichtfeldes beschrieben werden. Auch bei einem FELO muss der Überlapp zwischen dem umlaufenden Lichtpuls und dem Elektronenpaket gegeben sein (Ort, Winkel, Zeit und Photonenenergie bzw. Wellenlänge), um Verstärkung zu erzielen. Die bestehenden FELOs arbeiten in Wellenlängenbereichen, in denen es Spiegel für senkrechten Einfall gibt, die normalerweise das gesamte Spektrum des Strahlungspulses reflektieren, im Gegensatz zu dem in dieser Arbeit vorgestellten XFELO, dessen Resonator nur eine schmalbandige spektrale Transferfunktion besitzt. Aus dem Grund der nicht verfügbaren Spiegel mit hoher Güte werden bisher unterhalb von $\lambda_{\text{Rad}} \approx 180 \text{ nm}$ keine FELOs aufgebaut, sondern ausschließlich auf „stark“-verstärkende einmal undulatordurchlaufende FELs als Lichtquelle gesetzt.

2.4. Kurzwellige FELs mit erhöhter zeitlicher Kohärenz

Der SASE-Prozess ist als Quelle für intensive RÖNTGEN-Strahlung unersetzbar. Die oben erwähnten geringen temporalen Kohärenzeigenschaften haben eine ganze Reihe von Forschungsaktivitäten zur Erzeugung vollständig kohärenter Strahlungspulse zur Folge (FELDHAUS *et al.*, 1997; SALDIN *et al.*, 2001; KIM *et al.*, 2008; BÖDEWADT, 2011; AMANN *et al.*, 2012), um nur einige zu nennen.

Der Ansatz ist, einen longitudinalen kohärenten Lichtpuls zu verstärken und dessen Kohärenzeigenschaften zu erhalten. Die Schwierigkeit ist, einen ausreichend intensiven Lichtpuls zu generieren, um den SASE-Prozess, der nicht unterdrückbar ist, deutlich zu überlagern und einen hohen Kontrast zwischen SASE-Strahlung und dem verstärkten initialen Lichtpuls zu erhalten. Zunächst sind geeignete Lichtquellen konventionelle Lasersysteme (Verstärkermedium: Kristalle, Farbstoffe, Gase), die Licht in einem begrenzten Wellenlängenbereich emittieren, in denen es geeignete Anregungszustände gibt. Je kurzwelliger die emittierte Wellenlänge des Laserniveaus ist, desto komplexer wird die Anregung des Atomniveaus, da die Relaxationszeiten der Niveaus kürzer werden (MATTHEWS *et al.*, 1985; SUCKEWER *et al.*, 1985, 2009). Die derzeit kürzeste erzeugte Wellenlänge eines Röntgenlasers liegt bei $\lambda_{\text{Rad}} = 1.46 \text{ nm}$. Zur Anregung des Lasermediums wurde ein SASE-FEL genutzt (ROHRINGER *et al.*, 2012). Es gibt also keine longitudinal kohärenten konventionellen Laserquellen im Spektralbereich des Röntgenlicht mit ausreichender Pulsenergie.

Die kürzeste Wellenlänge eines Verstärker-Experiments, dessen inertielle Lichtpulse mit einem konventionellen Laser erzeugt werden, ist das sFLASH-Experiment (BÖDEWADT, 2011). Die kurzen Wellenlängen werden mit **H**ohe-**H**armonische-**G**eneration (HHG) in einem Gasstrom erzeugt, um damit ein FEL-Verstärker bei $\lambda_{\text{Rad}} = 38 \text{ nm}$ aufzubauen (BÖDEWADT, 2011).

Das Generieren initialer Lichtpulse mit noch kürzeren Wellenlängen hinreichender Intensität ist mit HHG aufgrund der geringen Konversionseffizienzen (derzeit) nicht möglich. Für diesen Wellenlängenbereich ($\lambda_{\text{Rad}} < 38 \text{ nm}$) wird der initiale Lichtpuls in einem vorangestellten SASE-Undulator erzeugt und durch Filtern des Spektrums ein schmalbandiger Lichtpuls mit erhöhter zeitlicher Kohärenz erzeugt. Die transversale Kohärenz ist nicht zwingend erforderlich, wegen der Modenselektion der FEL-Verstärkung (siehe oben). In einem zweiten Undulator wird der Lichtpuls bis zur Sättigung verstärkt. Die „self-seeding“-Technik ermöglicht es, die zeitliche Kohärenz des Röntgenlichtpulses im Vergleich zu SASE-Pulsen zu erhöhen (FELDHAUS *et al.*, 1997). Durch den Einsatz von Monochromatoren wird die erhöhte zeitliche Kohärenz erreicht. Aus der Verringerung der Bandbreite folgt bei gleicher Ausgangsleistung, Quellgröße und Divergenz eine Steigerung der Spitzenbrillanz. Im Spektralbereich des vakuum-ultravioletten (VUV) Lichts sind optische Gitter geeignete Filter. Für Photonen mit einer Wellenlänge $< 5 \text{ \AA}$ (FREELAND *et al.*, 2002) ist ein geeigneter Filter ein BRAGG-Kristall, um den Strahlungspuls in seiner Bandbreite einzuschränken (SALDIN *et al.*, 2001).

Eine magnetische Schikane führt das Elektronenpaket um die Filteranordnung auf der Undulatorachse. Zum einen gleicht diese Schikane den Weglängenunterschied des Lichts (Monochromator verlängert den optischen Weg) und der Elektronen aus. Zum anderen wird die Dichtemodulation, die im ersten Undulator im Elektronenpaket entstanden ist, ausgewaschen, sodass im zweiten Undulator eine neu erzeugte Dichtemodulation den Verstärkungsprozess dominiert, die von den Eigenschaften des monochromatisierten Lichtpulses definiert wird (FELDHAUS *et al.*, 1997). Die Längen der magnetischen Schikanen für ein „self-seeding“-Experiment am European XFEL können zwischen 5 m und 60 m lang sein (GELONI *et al.*, 2010a; SALDIN *et al.*, 2001).

Die Linac Coherent Light Source (LCLS) am Stanford Linear Accelerator Center (SLAC) in Stanford, USA hat ein „self-seeding“-Experiment erfolgreich bei $\lambda_{\text{Rad}} = 1.5 \text{ \AA}$ demonstriert (AMANN *et al.*, 2012). Eine vergleichbare Technik ist ebenfalls am European XFEL geplant (GELONI *et al.*, 2010a).

2.5. Undulatorstrahlung

Geladene Teilchen, die sich mit relativistischer Geschwindigkeit bewegen, emittieren tangential zu ihrer Bewegungsrichtung Synchrotronstrahlung, wenn sie transversal zu ihrer Bewegungsrichtung abgelenkt werden (JACKSON, 1966, S. 669 ff). Die abgestrahlte Leistung eines Teilchens der Masse m_0 , das sich auf einem Kreisbogen mit Radius r_{DM} bewegt, ist gegeben durch

$$P_{\text{Syn}} = \frac{Z^2 e^2 E_B^4}{\epsilon_0 c_0^3 m_0^4 r_{\text{DM}}^2}, \quad (2.1)$$

wobei Ze die Ladung und E_B die Energie des Teilchens, ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante und c_0 die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist. Aufgrund der starken Abhängigkeit bezüglich des Verhältnisses zwischen Energie der Teilchen und ihrer Ruhemasse E_B/m_0 werden für beschleunigerbasierte Lichtquellen Elektronen oder Positronen genutzt. Die Strahlung, die in einem Kegel mit einem Öffnungswinkel von $\theta_{\text{cl}} \approx 1/\gamma_{\text{rel}}$ in Bewegungsrichtung des Teilchens emittiert

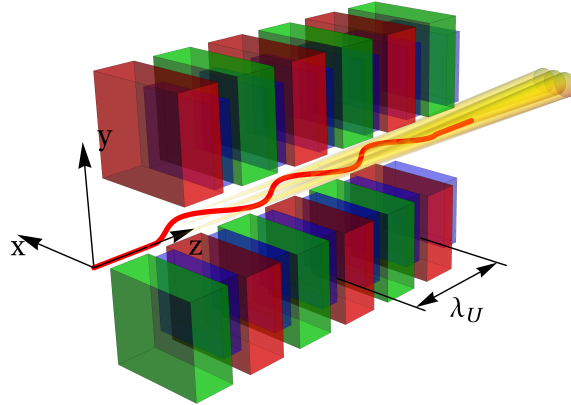


Abbildung 2.3.: Schematische Darstellung eines planaren Undulators mit Elektronentrajektorie (rot) und Strahlungskegel (gelb).

wird, hat ein kontinuierliches Frequenzspektrum dessen Grenzfrequenz durch

$$\omega_{\text{Krit}} = \frac{3c_0\gamma_{\text{rel}}^3}{2r_{\text{DM}}} \quad (2.2)$$

charakterisiert ist, wobei γ_{rel} der relativistische LORENTZ-Faktor der Elektronen ist.

Eine periodische Überlagerung der Strahlung eines Ablenkmagneten führt zu einer Erhöhung der Intensität und zu einem Wellenzug mit N_U Oszillationen, wobei N_U die Anzahl der Perioden ist. Ein Linienspektrum aufgrund von konstruktiver und destruktiver Interferenz entsteht, wenn der Ablenkwinkel der Elektronen

$$\theta_z = \frac{K}{\gamma_{\text{rel}}}, \quad (2.3)$$

mit dem Undulatorparameter K (Gl. 2.4), kleiner ist als der. Das ist für $K < 1$ der Fall. Eine solche periodisch alternierende magnetische Dipolanordnung (Abb. 2.3) wird Undulator genannt. Im Fall von $K > 1$ spricht man von einem Wiggler. Der Undulatorparameter ist gegeben durch

$$K = \frac{eB_0\lambda_U}{2\pi m_e c_0}, \quad (2.4)$$

mit dem magnetischen Feld auf der Undulatorachse B_0 und der Undulatorperiode λ_U , dem Abstand von einem Dipol zu dem nächsten Dipol gleicher Polarität. Die Einheit der abgestrahlten Photonen pro Zeit, Quellgröße, Divergenz und spektrale Bandbreite wird Brillanz genannt. Für einen Lichtpuls aus einem Undulator ist sie um ein vielfaches höher als bei einem Lichtpuls aus einem Ablenkmagneten.

Die Trajektorie eines Elektrons ist aufgrund der sinusförmigen Abhängigkeit des magnetischen

Felds eines Undulators in longitudinaler Richtung

$$B_y(z) = B_0 \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_U} z\right) \quad (2.5)$$

sinusförmig (Abb. 2.3). Die Strahlungsanteile der vorangegangenen Perioden überlagern sich mit der gerade emittierten Strahlung, da sich das Elektron langsamer als das Licht bewegt und eine längere Trajektorie durch den Undulator hat. Die horizontale Komponente der Bewegung des Elektrons in einem planaren Undulator ist gegeben durch

$$\gamma_{\text{rel}} m_e \frac{dv_x}{dt} = ev_z B_y = -ev_z B_0 \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_U} z\right). \quad (2.6)$$

Ein planarer Undulator erzeugt linear polarisiertes Licht. Die horizontale Geschwindigkeitskomponente v_x kann unter der Annahme eines konstanten relativistischen LORENTZ-Faktors (kein elektrisches Feld vorhanden) mit der Näherung erster Ordnung bestimmt werden zu

$$v_x \approx \frac{K c_0}{\gamma_{\text{rel}}} \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_U} z\right). \quad (2.7)$$

Die Geschwindigkeit des Elektrons v_z entlang der Undulatorachse z

$$v_z = \sqrt{|\vec{v}|^2 - v_x^2} \quad (2.8)$$

ändert sich periodisch, da sich die horizontale Geschwindigkeit periodisch ändert. Die mittlere longitudinale Geschwindigkeit ergibt sich zu

$$\bar{v}_z \approx c_0 \left(1 - \frac{1}{2\gamma_{\text{rel}}^2} \left(1 + \frac{K^2}{2}\right)\right). \quad (2.9)$$

Die abgestrahlte Kreisfrequenz der Undulatorstrahlung im Laborsystem ω_{Rad} lässt sich aus der LORENTZ-Transformation der Kreisfrequenz ω^* des Lichts im mitbewegten Koordinatensystem des Elektrons bestimmen (DOHLUS *et al.*, 2008, S. 15 ff)

$$\omega^* = \frac{2\pi \bar{\gamma}_{\text{rel}} c_0}{\lambda_U} \quad (2.10) \quad \omega_{\text{Rad}} = \frac{\omega^*}{\bar{\gamma}_{\text{rel}} (1 - \bar{\beta}_{\text{rel}} \cos \theta)} \quad (2.11)$$

wobei $\bar{\beta}_{\text{rel}} = \bar{v}_z/c_0$, $\bar{\gamma}_{\text{rel}}$ der relativistische LORENTZ-Faktor der mittleren longitudinalen Geschwindigkeit der Elektronen $\bar{v}_z$ und θ der Beobachtungswinkel zur Undulatorachse ist. Mit der Näherung $\cos \theta \approx 1 - \theta^2/2$ für $\theta \leq 1/\gamma_{\text{rel}} \ll 1$ ergibt sich für die abgestrahlte Wellenlänge der Undulatorstrahlung

$$\frac{\lambda_{\text{Rad}}}{n} = \frac{\lambda_U}{2n\gamma_{\text{rel}}^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} + \gamma_{\text{rel}}^2 \theta^2\right), \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.12)$$

wobei n die Harmonischenzahl ist. Für die vorwärts gerichtete Strahlung auf der Undulatorachse $\theta = 0$ heben sich die geraden Harmonischen auf.

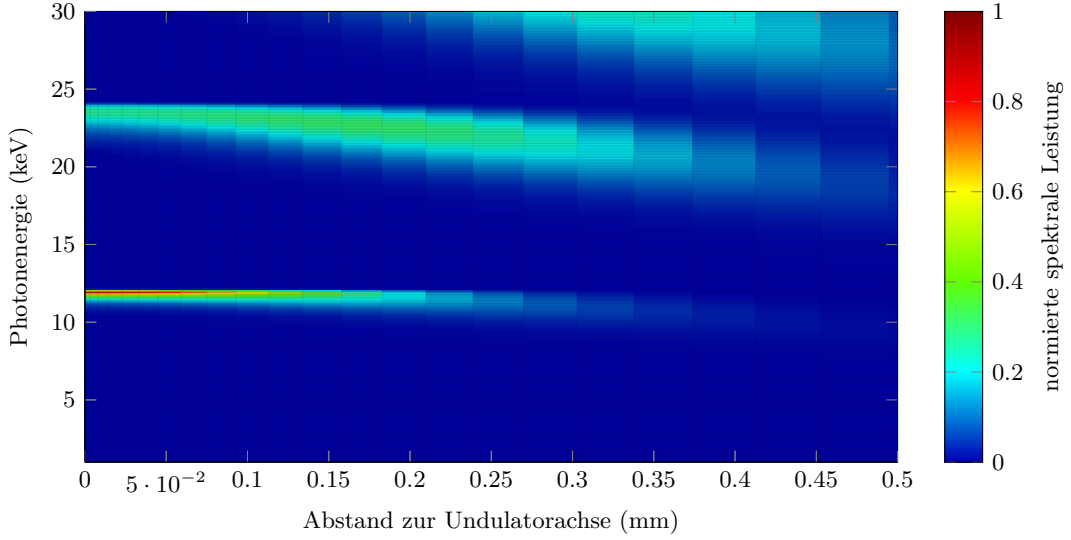


Abbildung 2.4.: Undulatorspektrum in Abhängigkeit vom radialen Abstand zur Undulatorachse für einen Undulator, wie er in den numerischen Simulationen für die thermische Entwicklung der BRAGG-Kristalle genutzt wird (siehe Kapitel 7). Für das hier gezeigte Spektrum wurde eine Elektronenenergie von $E_B = 14.5 \text{ GeV}$, ein Undulatorparameter von $K = 3$ und eine mittlere Strahlgröße $\sigma_R = 20 \mu\text{m}$ angenommen.

Die Intensitätsfunktion der Undulatorstrahlung in Abhängigkeit von der Frequenz ist durch

$$I(\omega) \propto \left(\frac{\sin(\xi)}{\xi} \right)^2 \quad \text{mit} \quad \xi = \pi N_U \frac{\omega_1 - \omega}{\omega_1} \quad (2.13)$$

gegeben, wobei die Intensitätsverteilung ein Maximum bei $\omega = \omega_1$ und eine Breite bei halber Höhe vom Maximum von $\Delta\omega \approx \omega_1/N_U$ hat. Die spektrale Bandbreite der Undulatorstrahlung beträgt

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{1}{nN_U}, \quad (2.14)$$

wobei N_U die Anzahl der Undulatorperioden ist.

Abbildung 2.4 zeigt ein Undulatorspektrum in 9.166 m Entfernung für genauer diskutierte Parameter (siehe Abschnitt 6, Tab. 6.1). Berechnet wurde die spektrale Abhängigkeit der Undulatorstrahlung mit „xurgent“ aus **X**-ray **O**riented **P**rograms (XOP) (DEL RIO *et al.*, 2010).

2.6. FEL-Theorie

Die Wechselwirkung des Lichtfeldes mit dem Elektronenpaket und die Wechselwirkung jedes Elektrons mit dem Feld des Elektronpakets in Anwesenheit eines Magnetfeldes ist grundlegend für die Verstärkung des Lichtfeldes bei einem FEL (SALDIN *et al.*, 2000, S. 13). Eine transversale Geschwindigkeitskomponente ist notwendig, um einen Energieübertrag auf das elektrische Feld zu erhalten (vgl. Gl. 2.6). Diese ist jedoch nicht hinreichend. Zusätzlich muss noch ein bestimmter Phasenschlupf pro Undulatorperiode gewährleistet sein. Ein Energieübertrag dW/dt

von den Elektronen auf das Lichtfeld E_x findet nur statt, wenn die zeitliche Ableitung der Elektronenenergie kleiner Null ist:

$$\frac{dE_B}{dt} = -ev_x(t)E_x(t) \quad (2.15) \quad E_x = E_0 \cos(k_{\text{Rad}}z - \omega t - \psi_0). \quad (2.16)$$

Hier wurde sich auf einen planaren Undulator beschränkt mit E_B der Energie der Elektronen, E_0 der Amplitude des Lichtfeldes, $k_{\text{Rad}} = 2\pi/\lambda_{\text{Rad}}$ der Wellenzahl der abgestrahlten Wellenlänge und ψ_0 einer beliebigen konstanten Phase zwischen Lichtfeld und Elektronen. Werden Gl. 2.7 und Gl. 2.16 in Gl. 2.15 eingesetzt, so ergeben sich beim Zusammenfassen der cos-Terme zwei Argumente

$$\psi = (k_{\text{Rad}} + k_U)z - \omega_{\text{Rad}}t + \psi_0 \quad (2.17) \quad \phi = (k_{\text{Rad}} - k_U)z - \omega_{\text{Rad}}t + \psi_0, \quad (2.18)$$

mit $k_U = 2\pi/\lambda_U$. ψ wird als ponderomotive Phase bezeichnet. Einen positiven Energieübertrag auf das Lichtfeld ist nur für ein konstantes ψ zu erreichen (HUANG *et al.*, 2007)

$$\frac{d\psi}{dz} = (k_{\text{Rad}} + k_U) - \frac{\omega_{\text{Rad}}}{\bar{v}_z} = 0, \quad (2.19)$$

mit $dz = \bar{v}_z dt$. Eine konstante Phasenbeziehung zwischen Elektron und Lichtfeld wird erreicht, wenn das Elektron eine Wellenlänge gegenüber der Lichtwelle pro Undulatorperiode zurückbleibt. Die verstärkte Wellenlänge eines FELs ist gegeben durch (SALDIN *et al.*, 2000, S. 6)

$$\lambda_{\text{Rad}} \approx \frac{\lambda_U}{2\gamma_r^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right), \quad (2.20)$$

wobei γ_r der relativistische LORENTZ-Faktor der Elektronen ist, welches Gl. 2.12 für $n = 1$ erfüllt. Ein Vergleich mit Gl. 2.12 zeigt, dass ein Undulator mit $\theta = 0$ eine geeignete Lichtquelle für einen FEL darstellt. Die Terme mit dem Argument ϕ heben sich innerhalb einer Undulatorperiode auf, da die Frequenz der Oszillation doppelt so groß ist wie bei ψ .

2.6.1. Schwach verstärkender FEL

Unter der Annahme, dass die Änderung der Amplitude des elektrischen Feldes und der Elektronenpulsseigenschaften beim Durchgang durch den Undulator klein ist, lassen sich aus Gl. 2.15 und Gl. 2.19 unter Einführung von $\eta = (\gamma_{\text{rel}} - \gamma_r)/\gamma_r$, der relativen Energieabweichung von der Sollenergie der Elektronen, zwei Differentialgleichungen ableiten. Diese beschreiben die Entwicklung der ponderomotiven Phase und relativen Energieabweichung der Elektronen entlang des Undulators

$$\frac{d\psi}{dz} = 2k_U\eta \quad (2.21) \quad \frac{d\eta}{dz} = \frac{-eE_0K}{2m_e c_0^2 \gamma_r^2} \cos \psi. \quad (2.22)$$

Diese Pendelgleichungen beschreiben einen „schwach“-verstärkenden FEL, dessen Verstärkung $G = \Delta E/E$ gegeben ist durch (DOHLUS *et al.*, 2008, S. 33)

$$G(\xi) = \frac{\Gamma^3 N_U^3 \lambda_U^3}{2} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{\sin^2 \xi}{\xi^2} \right), \quad (2.23)$$

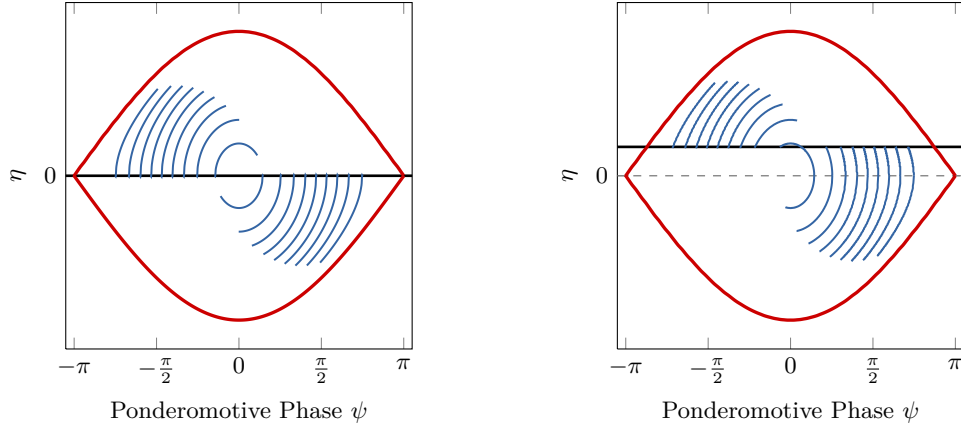


Abbildung 2.5.: Phasenraumdarstellung eines „schwach“ verstärkenden FELs. Links: Elektronenenergie γ_{rel} gleich Resonanzenergie γ_r . Es findet im Mittel über alle Teilchen kein Energieübertrag an das Lichtfeld statt. Rechts: Elektronenenergie γ_{rel} größer als Resonanzenergie γ_r . Es findet im Mittel über alle Teilchen ein positiver Energieübertrag auf das Lichtfeld statt.

mit $\xi = 2\pi N_U \eta$ und dem Verstärkungsfaktor Γ (DOHLUS *et al.*, 2008, S. 54)

$$\Gamma = \left[\frac{\mu_0 \hat{K}^2 e^2 k_U n_e}{4\gamma_r^3 m_e} \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (2.24)$$

Gleichung 2.23 wird als MADEY-Theorem bezeichnet. Ein modifizierter Undulatorparameter

$$\hat{K} = K \left(J_0 \left(\frac{K^2}{4 + 2K^2} \right) - J_1 \left(\frac{K^2}{4 + 2K^2} \right) \right),$$

der die longitudinalen Oszillationen berücksichtigt, die bei der Bildung der mittleren longitudinalen Geschwindigkeit v_z vernachlässigt worden sind, muss eingeführt werden. J_0 und J_1 sind die BESSEL-Funktionen nullter bzw. erster Ordnung. Abbildung 2.5 stellt ein Phasenraumdiagramm (ψ, η) dar, welches den Energieübertrag von den Elektronen auf das Lichtfeld veranschaulicht. In Abb. 2.5 (links) ist die anfängliche Elektronenenergie gleich der Resonanzenergie (vgl. Gl. 2.12). In diesem Fall geben gleich viele Elektronen Energie an das Lichtfeld ab, wie sie vom Lichtfeld erhalten. Der Nettoenergieübertrag ist gleich Null. Wird die Elektronenenergie γ_{rel} leicht erhöht, ändert sich das Verhältnis der Elektronen, die Energie an das Lichtfeld abgeben und vom Lichtfeld erhalten. Der Energieübertrag ist positiv (siehe Abb. 2.5 (rechts)). Ist die Elektronenenergie γ_{rel} niedriger als die Resonanzenergie γ_r wird Energie vom Lichtfeld auf das Elektronenpaket übertragen. Diese Abhängigkeit des Energieübertrags von der Elektronenenergie (Gl. 2.23) bildet die Grundlage eines „schwach“ verstärkenden FELs (MADEY, 1979). Abbildung 2.6 stellt diese Abhängigkeit graphisch dar. Abbildung 2.6 stellt die Intensitätsverteilung in Abhängigkeit von der Frequenz der ersten Undulatorharmonischen dar. Die linke Abbildung zeigt die Verstärkung in Abhängigkeit von der relativen Energieabweichung nach dem MADEY-Theorem.

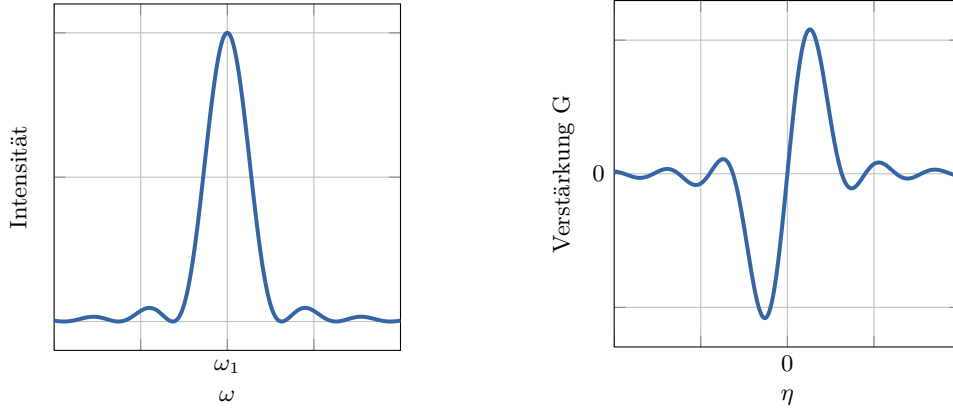


Abbildung 2.6.: Links: Normierte Intensitätsverteilung der ersten Harmonischen der Undulatorstrahlung. Rechts: Normierte Verstärkungskurve in Abhängigkeit von der relativen Energieabweichung nach dem MADEY-Theorem.

2.6.2. Stark verstärkender FEL

Die Annahme, dass sich die Amplitude des elektrischen Feldes beim Durchlauf durch den Undulator nur wenig ändert, ist im Fall eines „stark“-verstärkenden FELs nicht gültig. Die dynamischen Prozesse im Elektronenpaket und die Entwicklung der elektromagnetischen Strahlung entlang der Undulatorachse z müssen berücksichtigt werden (DOHLUS *et al.*, 2008, S. 37).

Gleichung 2.22 muss um ein von der longitudinalen Koordinate abhängiges komplexes elektromagnetisches Feld $\tilde{E}_x$, einer Wechselwirkung der Elektronen untereinander und einer Wechselwirkung der Elektronen mit dem elektromagnetischen Feld, ausgedrückt über die komplexe Stromdichte $\tilde{j}_1$, siehe Gl. 2.25b, erweitert werden. Daraus ergeben sich $(2N_e + 2)$ gekoppelte Differentialgleichungen erster Ordnung (vgl. DOHLUS *et al.*, 2008, S. 48)

$$\frac{d\psi_n}{dz} = 2\frac{2\pi}{\lambda_U}\eta_n, \quad n = 1 \dots N_e \quad (2.25a)$$

$$\frac{d\eta_n}{dz} = -\frac{e}{m_e c_0^2 \gamma_r} \operatorname{Re} \left[\left(\frac{\hat{K} \tilde{E}_x}{2\gamma_r} - \frac{i\mu_0 c_0^2}{\omega_{\text{Rad}}} \cdot \tilde{j}_1 \right) \exp(i\psi_n) \right] \quad (2.25b)$$

$$\tilde{j}_1 = \tilde{j}_0 \frac{2}{N_e} \sum_{n=1}^{N_e} \exp(-i\psi_n) \quad (2.25c)$$

$$\frac{\tilde{E}_x}{dz} = -\frac{\mu_0 c_0 \hat{K}}{4\gamma_r} \cdot \tilde{j}_1. \quad (2.25d)$$

ψ_n ist die ponderomotive Phase für das n -te Elektron, η_n die relative Energieabweichung des n -ten Elektrons von der Resonanzenergie der Elektronen γ_r , N_e die Anzahl der Elektronen im Elektronenpaket, $\tilde{j}_1$ die komplexe modulierte Stromdichte und $\tilde{E}_x$ die komplexe Amplitude des Lichtfeldes. Die Lösung des Gleichungssystems Gl. 2.25 kann selbst bei Vernachlässigung der transversalen Dimensionen nur numerisch erfolgen. Nur mit weiteren Annahmen lässt sich das Gleichungssystem in eine analytisch lösbare Form bringen.

Eine analytische Lösung, aus der viele Rückschlüsse auf den Verstärkungsprozess gezogen werden können, lässt sich unter der Annahme, dass die periodische Dichtemodulation der Elek-

tronen klein gegenüber der konstanten Stromdichte bleibt und nur die longitudinale Dimension berücksichtigt wird, bestimmen. Die Annahme ist bis auf den Bereich der Sättigung gültig. Um Sättigungseffekte zu untersuchen, muss das Gleichungssystem numerisch gelöst werden. Es gibt mehrere Programme zur numerischen Berechnung, des Gleichungssystems eines FELs, zum Beispiel GINGER, GENESIS oder FAST (FAWLEY, 2002; REICHE, 1999; SALDIN *et al.*, 1999). Mehr dazu in Abschnitt 6.1.

Das Gleichungssystem kann für ein monoenergetisches Elektronenpaket in eine Differentialgleichung (DGL) dritter Ordnung überführt werden (auf die Herleitung wird auf DOHLUS *et al.* (2008, S. 54ff) verwiesen):

$$0 = \frac{\tilde{E}_x'''(z)}{\Gamma^3} + 2i \frac{\eta}{\rho_{\text{FEL}}} \frac{\tilde{E}_x''(z)}{\Gamma^2} + \left(\frac{k_s^2}{\Gamma^2} - \frac{\eta^2}{\rho_{\text{FEL}}^2} \right) \frac{\tilde{E}_x'(z)}{\Gamma} - i \tilde{E}_x(z), \quad (2.26)$$

mit

$$k_s = \sqrt{\frac{2\lambda_{\text{Rad}}}{\lambda_U}} k_p \quad (2.27) \quad k_p = \sqrt{\frac{2I_P}{\gamma_r^3 I_A \sigma_x^2}} \quad (2.29)$$

$$\rho_{\text{FEL}} = \frac{1}{16} \frac{I_P}{I_A} \frac{\hat{K}^2}{\gamma_r^3 \sigma_x^2 k_U^2} \quad (2.28) \quad L_{G0} = \frac{\lambda_U}{4\sqrt{3}\pi\rho_{\text{FEL}}}, \quad (2.30)$$

mit k_s dem Raumladungsparameter, k_p der longitudinalen Plasmawellenzahl, ρ_{FEL} dem FEL- oder Effizienzparameter, L_{G0} der eindimensionalen Verstärkungslänge, I_A dem ALVEN-Strom, I_P dem Spitzenstrom und σ_x der rms-Strahlgröße. Die Lösung der Differentialgleichung dritter Ordnung wird in DOHLUS *et al.* (2008) beschrieben und hier nur teilweise wiedergegeben. Die Lösung der DGL erfolgt mit einem Ansatz einer exponentiellen Abhängigkeit gemäß $\exp(\alpha_D z)$. Die Lösung von E_x kann als Linearkombination dargestellt werden

$$\tilde{E}_x(z) = \sum_{j=1}^3 c_j V_j(z) \quad \text{mit } V_j(z) = \exp(\alpha_{Dj} z) \quad (2.31a)$$

$$\tilde{E}_x'(z) = \sum_{j=1}^3 c_j \alpha_{Dj} V_j(z) \quad (2.31b)$$

$$\tilde{E}_x''(z) = \sum_{j=1}^3 c_j \alpha_{Dj}^2 V_j(z). \quad (2.31c)$$

Da $V_j(0) = 1$ ist, können bei bekannten $\tilde{E}_x(0), \tilde{E}_x'(0), \tilde{E}_x''(0)$ die Koeffizienten c_j bestimmt werden, indem das daraus ableitbare Gleichungssystem gelöst wird. Wenn $\tilde{E}_x'(0) = 0$ und $\tilde{E}_x''(0) = 0$ angenommen wird, kann die Lösung der DGL mit

$$\tilde{E}_x(z) = \tilde{E}_x(0) (A_1 \cdot e^{\alpha_{D1} z} + A_2 \cdot e^{\alpha_{D2} z} + A_3 \cdot e^{\alpha_{D3} z}) \quad (2.32)$$

mit

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{\alpha_{D2}\alpha_{D3}}{(\alpha_{D1} - \alpha_{D2})(\alpha_{D1} - \alpha_{D3})} \\ A_2 &= \frac{\alpha_{D1}\alpha_{D3}}{(\alpha_{D2} - \alpha_{D1})(\alpha_{D2} - \alpha_{D3})} \\ A_3 &= \frac{\alpha_{D1}\alpha_{D2}}{(\alpha_{D3} - \alpha_{D2})(\alpha_{D3} - \alpha_{D1})} \end{aligned}$$

angegeben werden, wobei $\alpha_{D1}, \alpha_{D2}, \alpha_{D3}$ die drei Lösungen für α_D des Polynoms

$$0 = \rho_{\text{FEL}}^2 \alpha_D^3 + 2i\Gamma\eta\rho_{\text{FEL}}\alpha_D^2 + (k_p^2\rho_{\text{FEL}}^2 - \Gamma^2\eta^2)\alpha_D - i\Gamma^3\rho_{\text{FEL}}^2 \quad (2.33)$$

sind.

Die eindimensionale Verstärkungslänge L_{G0} der fundamentalen Wellenlänge kann durch Einführung einer Größe Λ erweitert werden, sodass Beugungseffekte der Strahlung, Divergenz und die Energieverteilung des Elektronenstrahls berücksichtigt werden (XIE, 2000). Die erweiterte Verstärkungslänge ist gegeben durch:

$$L_G = L_{G0}(1 + \Lambda), \quad (2.34)$$

mit

$$\begin{aligned} \Lambda &= a_1\eta_d^{a_2} + a_3\eta_\varepsilon^{a_4} + a_5\eta_\gamma^{a_6} + a_7\eta_\varepsilon^{a_8}\eta_\gamma^{a_9} + a_{10}\eta_d^{a_{11}}\eta_\gamma^{a_{12}} \\ &\quad + a_{13}\eta_\varepsilon^{a_{15}}\eta_d^{a_{14}} + a_{16}\eta_\gamma^{a_{19}}\eta_\varepsilon^{a_{18}}\eta_d^{a_{17}}, \end{aligned}$$

wobei drei Parameter für

$$\text{Beugung} \quad \eta_d = \frac{L_{G0}\lambda_{\text{Rad}}}{4\pi\sigma_x^2} \quad (2.35a)$$

$$\text{Divergenz} \quad \eta_\varepsilon = \frac{4\pi\varepsilon_N}{\beta_M\gamma_{\text{rel}}\lambda_{\text{Rad}}} L_{G0} \quad (2.35b)$$

$$\text{Standardabweichung der Energieverteilung der Elektronen} \quad \eta_\gamma = 4\pi\frac{L_{G0}}{\lambda_U}\sigma_\eta \quad (2.35c)$$

eingeführt werden. Darin sind ε_N die normierte Emittanz, β_M die mittlere Betafunktion (vgl. Gl. B.7) und σ_η die normierte Standardabweichung der Energieverteilung der Elektronen, die mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.45 & a_2 &= 0.57 & a_3 &= 0.55 & a_4 &= 1.6 \\ a_5 &= 3 & a_6 &= 2 & a_7 &= 0.35 & a_8 &= 2.9 \\ a_9 &= 2.4 & a_{10} &= 51 & a_{11} &= 0.95 & a_{12} &= 3 \\ a_{13} &= 5.4 & a_{14} &= 0.7 & a_{15} &= 1.9 & a_{16} &= 1140 \\ a_{17} &= 2.2 & a_{18} &= 2.9 & a_{19} &= 3.2 \end{aligned}$$

skaliert werden. Aus den Parametern in Gl. 2.35a, 2.35b, 2.35c lassen sich die Einflüsse auf die Verstärkungslänge L_G eines FELs bestimmen. Zunächst muss die eindimensionale Verstärkungslänge kurz sein (einige Meter). Da die eindimensionale Verstärkungslänge mit der Strahlgröße skaliert $L_{G0} \propto n_e^{-1/3} \propto (\sigma_x\sigma_y\sigma_z)^{1/3}$ (Gl. 2.30) und die Länge des Elektronenpakets σ_z

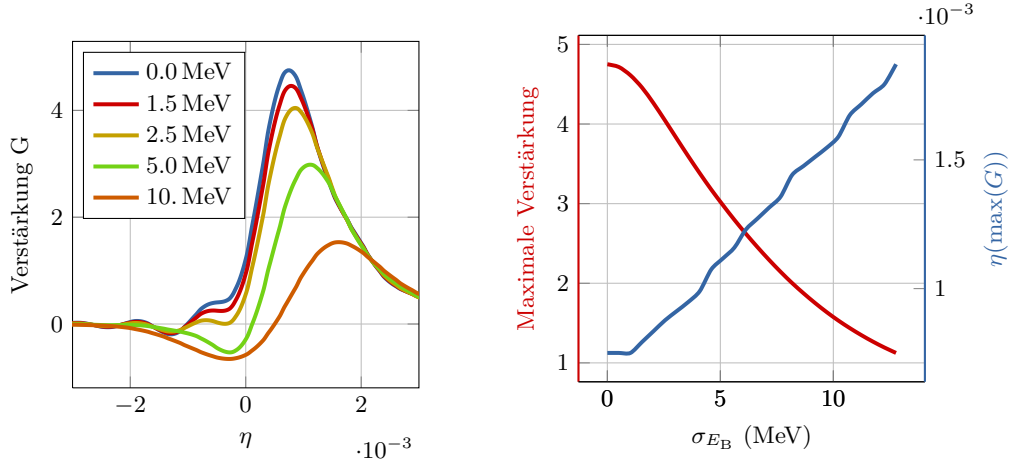


Abbildung 2.7.: FEL Verstärkung für verschiedene Standardabweichungen der Energieverteilung der Elektronen, berechnet für einen $L_U = 15$ m langen Undulator, einer mittleren Betafunktion $\beta_M = 15$ m, einer Undulatorperiode von $\lambda_U = 3$ cm, dem Undulatorparameter $K = 3.00$ und einer Elektronenenergie von $E_B = 14.5$ GeV. Links: FEL-Verstärkung in Abhängigkeit von der relativen Energieabweichung. Rechts: Maximale Verstärkung und relative Energieabweichung η für die maximale Verstärkung in Abhängigkeit von der Standardabweichung der Energieverteilung der Elektronen.

und der Spitzenstrom I_P zusammenhängen $\sigma_z \propto I_P^{-1}$ folgt, dass die transversalen Emittanzen $\varepsilon_{x,y} = \sigma_{x,y}^2 \beta_{x,y}$ klein und der Spitzenstrom I_P hoch sein müssen, da die Elektronendichte über den gesamten Undulator hoch sein muss. Ein Kriterium an die normierte Emittanz ε_N ist gegeben durch (DOHLUS *et al.*, 2008, S. 92)

$$\varepsilon_N < \frac{\gamma_{\text{rel}} \lambda_{\text{Rad}}}{4\pi}. \quad (2.36)$$

Eine zu große Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung hat zur Folge, dass die Elektronen unterschiedliche longitudinale Geschwindigkeiten v_z haben. Wenn diese Standardabweichung zu groß ist, liegt die relative Energieabweichung außerhalb der Bandbreite des FEL-Verstärkers und die Verstärkung nimmt ab. Die Bandbreite ist ein Ergebnis der DGL 2.26 für unterschiedliche γ_r und ist durch den FEL-Parameter ρ_{FEL} gegeben. Die normierte Standardabweichung der Energieverteilung der Elektronen muss kleiner sein als die Bandbreite des Verstärkers

$$\sigma_\eta < \rho_{\text{FEL}}. \quad (2.37)$$

In Abbildung 2.7 (links) ist die Verstärkung in Abhängigkeit von der relativen Energieabweichung für verschiedene Standardabweichungen der Energieverteilung der Elektronen aufgetragen. Die Berechnungen sind mit GENESIS durchgeführt worden. Die Parameter für die Berechnung sind in Tab. 2.1 zusammengefasst. Entsprechend den Erwartungen nimmt die Verstärkung mit zunehmender Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung ab. Das Maximum der Verstärkung verschiebt sich zu größeren relativen Energieabweichungen. Abbildung 2.7 (rechts) zeigt die Abhängigkeit der maximalen Verstärkung in Abhängigkeit von der Standard-

Tabelle 2.1.: Parameter für Berechnung der Verstärkung aus Abb. 2.7.

Elektronenenergie E_B	GeV	14.5
Undulatorparameter K		3.00
rms-Strahlgröße σ_R	μm	14.5
Undulatorlänge L_U	m	15.0
Undulatorperiode λ_U	m	0.03

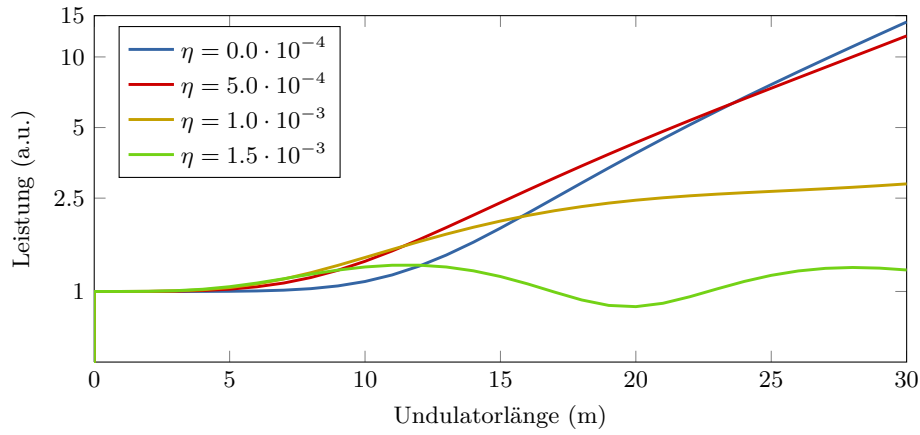


Abbildung 2.8.: Leistung des Lichtfelds in Abhängigkeit von der Undulatorlänge für verschiedene relative Energieabweichungen von der mittleren Elektronenenergie.

abweichung der Elektronenenergieverteilung (rot). Zusätzlich ist die relative Energieabweichung für die maximale Verstärkung in Abhängigkeit von der Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung aufgetragen (blau). Aus dieser Betrachtung lässt sich die optimale relative Energieabweichung eines XFELs bestimmen.

In Abb. 2.8 ist die Verstärkung in Abhängigkeit von der Länge des Undulators für verschiedene relative Energieabweichungen von der mittleren Elektronenenergie dargestellt. Die Berechnung ist mit der Lösung der Differentialgleichung dritter Ordnung erfolgt. Es ist zu erkennen, dass die Verstärkung für $\eta \neq 0$ für einen kurzen Undulator größer ist als für $\eta = 0$. Ab einer bestimmten Länge des Undulators ist die Verstärkung mit $\eta = 0$ am größten. Der Grund hierfür ist das Lethargieregime in den ersten zwei Verstärkungslängen eines „stark“ verstärkenden FELs.

Diese Betrachtung ist hinsichtlich der numerischen Simulationen, die im Rahmen dieser Arbeit mit GINGER und GENESIS durchgeführt worden sind, hilfreich, um die Parameter für die Simulation festzulegen.

2.7. Eigenschaften der FEL-Strahlung

Die spektrale rms Bandbreite σ_ω (vgl. DOHLUS *et al.*, 2008, S.114) der FEL-Strahlung ist durch den FEL-Parameter ρ_{FEL} gegeben. Im Bereich der exponentiellen Verstärkung beträgt sie

$$\frac{\sigma_\omega(z)}{\omega_{\text{Rad}}} = 3\sqrt{2}\rho_{\text{FEL}}\sqrt{\frac{L_{\text{G0}}}{z}}. \quad (2.38)$$

Die Brillanz ist eine Größe, um die FEL-Strahlung zu charakterisieren. Sie ist gegeben durch die Intensität des Strahlungspulses, dem Öffnungswinkel und der spektralen Reinheit der Strahlung

$$B = \frac{\Phi}{4\pi\Sigma_x\Sigma_{\theta x}\Sigma_y\Sigma_{\theta y}}, \quad (2.39)$$

wobei Φ die Anzahl der Photonen pro Sekunde normiert auf die Bandbreite bezüglich 0.1 %. Die Größen Σ_x , Σ_y , $\Sigma_{\theta x}$ und $\Sigma_{\theta y}$ sind gegeben durch die Standardabweichung der transversalen Photonen- bzw. der Elektronenverteilungsfunktion für die transversalen Strahlgrößen in x- und y-Richtung $\sigma_{x,ph}$, $\sigma_{x,e}$, $\sigma_{y,ph}$, $\sigma_{y,e}$ und der Divergenz $\sigma_{\theta x,ph}$, $\sigma_{\theta x,e}$, $\sigma_{\theta y,ph}$, $\sigma_{\theta y,e}$

$$\Sigma_x = \sqrt{\sigma_{x,e}^2 + \sigma_{x,ph}^2} \qquad \Sigma_{\theta x} = \sqrt{\sigma_{\theta,e}^2 + \sigma_{\theta,ph}^2}.$$

Für eine vollständig transversal kohärente Lichtquelle sind die Strahlgröße und die Divergenz nicht mehr unabhängig voneinander. Für eine Lichtquelle, bestehend aus der fundamentalen GAUSS-Mode, ergibt sich für die Brillanz (vgl. DOHLUS *et al.*, 2008, S.153)

$$B = \frac{4\Phi}{\lambda_{\text{Rad}}^2}. \quad (2.40)$$

Die zeitliche Kohärenz ist gegeben durch die Kohärenzzeit τ_{Koh} . Diese wird mit der ersten Ordnung zeitlichen normierten Korrelationsfunktion beschrieben (GELONI *et al.*, 2010b):

$$g_1(\vec{r}, t_1 - t_2) = \frac{\langle \tilde{E}_x(\vec{r}, t_1) \tilde{E}_x^*(\vec{r}, t_2) \rangle}{\sqrt{\langle |\tilde{E}_x(\vec{r}, t_1) \tilde{E}_x^*(\vec{r}, t_1)|^2 \rangle \langle |\tilde{E}_x(\vec{r}, t_2) \tilde{E}_x^*(\vec{r}, t_2)|^2 \rangle}}, \quad (2.41)$$

wobei die eckigen Klammern eine Mittlung über ein Ensemble von Pulsen bedeutet. Der Betrag der Korrelationsfunktion ist symmetrisch $|g_1(\tau)| = |g_1(-\tau)|$ und der Funktionswert bei $\tau = 0$ ist $g_1(0) = 1$. Unter der Annahme, dass das elektrische Feld mit einer Stromdichtefunktion und einer Transmissionsfunktion, die sich in Sättigung mit einer GAUSSverteilung nähern lässt, beschrieben werden kann, vereinfacht sich die zeitliche Korrelationsfunktion zu (DOHLUS *et al.*, 2008, S.66, 106, 113).

$$g_1(t - t') = \exp\left(-\frac{\sigma_\omega^2(t - t')^2}{2}\right). \quad (2.42)$$

Die Kohärenzzeit ist dann gegeben durch

$$\tau_{\text{Koh}} = \int (g_1(t))^2 dt \approx \frac{\sqrt{\pi}}{\sigma_\omega}. \quad (2.43)$$

Im Fall des European XFELs ist die Kohärenzzeit der SASE-Pulse (GELONI *et al.*, 2010b)

$$\tau_{\text{Koh, XFEL}} \approx 0.2 \text{ fs.} \quad (2.44)$$

Die Anzahl der longitudinal unabhängigen Moden in einem Strahlungspuls lassen sich als Quotient aus der Pulslänge und der Kohärenzzeit bestimmen

$$M = \frac{t_{\text{Phot, C}}}{\tau_{\text{Koh}}}, \quad (2.45)$$

wobei ein rechteckiger Strahlungspuls der Länge $t_{\text{Phot, C}}$ angenommen wird.

Die transversalen Kohärenzeigenschaften werden mit der normierten räumlichen Kohärenzfunktion beschrieben

$$\gamma_1(\vec{r}_{1,\perp}, \vec{r}_{2,\perp}, z, t) = \frac{\langle \tilde{E}_x(\vec{r}_{1,\perp}, z, t) \tilde{E}_x^*(\vec{r}_{2,\perp}, z, t) \rangle}{\sqrt{\langle |\tilde{E}_x(\vec{r}_{1,\perp}, z, t)|^2 \rangle \langle |\tilde{E}_x(\vec{r}_{2,\perp}, z, t)|^2 \rangle}}. \quad (2.46)$$

Die Zeitabhängigkeit verschwindet aufgrund der Betrachtung von stationären Prozessen. Das Feld wird als statistisch homogen angesehen. Daher hängt die Korrelationsfunktion nur von der Differenz der transversalen Ortsvektoren $r_D = |\vec{r}_D|$ ab

$$\gamma_1(\vec{r}_{1,\perp}, \vec{r}_{2,\perp}, z) = \gamma_1(r_D, z).$$

Das Maß der Kohärenz für eine Fläche ist gegeben durch

$$S_c(z) = \int |\gamma_1(r_D, z)|^2 dr_D. \quad (2.47)$$

Der Kohärenzradius für ein isotropisches Feld ist definiert durch (SALDIN *et al.*, 2000, S. 410)

$$r_{\text{Koh}}(z) = \left(2 \int_0^\infty |\gamma_1(r_D, z)|^2 dr_D \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.48)$$

Die Anzahl der transversalen Moden innerhalb eine kreisförmigen Apertur a ist gegeben durch

$$M = \frac{a^2}{r_{\text{Koh}}^2}, \quad (2.49)$$

mit $a \gg r_{\text{Koh}}$.

Die analytische Betrachtung der eindimensionalen FEL-Theorie erlaubt es, qualitative Aussagen zu der Verstärkung eines XFELs zu machen und mit den numerischen Berechnungen zu vergleichen. Da die analytische Beschreibung aufgrund der gemachten Annahmen den Prozess der Sättigung nicht beschreibt, muss hierfür auf numerische Lösungen des Gleichungssystems zurückgegriffen werden. Für den European XFEL erfüllt die Strahlgröße die Bedingung (DOHLUS *et al.*, 2008, S. 194)

$$\sigma_R \ll \sqrt{\lambda_{\text{Rad}} L_{\text{G0}}} \quad (2.50)$$

nicht, und somit ist die eindimensionale Theorie für eine genaue Betrachtung nicht ausrei-

chend. Es müssen für eine genaue Beschreibung des FEL-Prozesses transversale Effekte mit berücksichtigt werden. Trotzdem ist die analytische Lösung der eindimensionalen Theorie zum Verständnis eines FELs hilfreich. Außerdem lassen sich mit der eindimensionalen Theorie zügig Abschätzungen machen, die für weiterführende Berechnungen hilfreich sind.

3. Grundlagen zur Röntgenlicht-Beugung

Der Resonator eines XFELs besteht aus BRAGG-Kristallen. Um einen XFEL zu berechnen, ist es notwendig die Reflexionseigenschaften der BRAGG-Kristalle zu kennen. Nicht nur die Reflektivität, auch die spektrale Breite, die Phase und die Winkelabhängigkeit der BRAGG-Reflexion sind Größen, die notwendig sind, um einen XFEL zu berechnen und die Eigenschaften der Strahlung zu bestimmen. Außerdem muss die Absorption des Lichts der Kristalle klein sein, damit der Temperaturanstieg des Kristalls (siehe Kapitel 7) gering ist, denn die reflektierte Wellenlänge ist temperaturabhängig. Die Höhe des Temperaturanstiegs ist von der absorbierten Energiedichte abhängig. Deshalb ist es notwendig, die Eindringtiefe der Strahlung in den Kristall im Bereich der BRAGG-Reflexion zu bestimmen, um die Temperaturänderung im Kristall berechnen zu können.

Im folgenden Kapitel erfolgt eine Einführung in die Grundlagen zur Berechnung der Beugung von Lichtwellen an periodischen Gittern. Zunächst wird die BRAGG-Reflexion beschrieben und durch die weiterführende dynamische Theorie der Röntgenbeugung an Netzebenen von Kristallen erweitert. Zudem wird die Eindringtiefe im Bereich der BRAGG-Reflexion beschrieben.

3.1. Bragg-Gesetz

Die BRAGG-Reflexion beruht auf der Streuung der einfallenden Welle an der periodischen Gitterstruktur von Kristallen (FRIEDRICH *et al.*, 1912; BRAGG, 1912; BRAGG *et al.*, 1913). In Abb. 3.1 ist die BRAGG-Reflexion schematisch dargestellt. Trifft eine ebene Welle auf einen Kristall, so werden nur die Wellenlängen reflektiert, deren Gangunterschied zwischen zwei Netzebenen ein Vielfaches der Wellenlänge ist (vgl. Gl. 3.1). Der Gangunterschied ist abhängig vom Einfallswinkel des Lichts. Dieser wird durch den BRAGG-Winkel θ_B beschrieben, welcher den Einfallswinkel zwischen Netzebenenschar und einfallendem Strahl angibt:

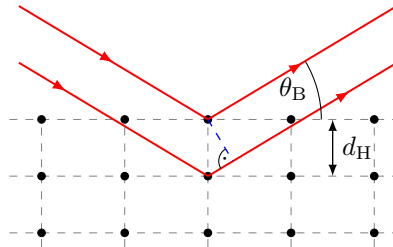


Abbildung 3.1.: Schematische Darstellung der BRAGG-Reflexion. Einfallende bzw. ausfallende Strahlen (rot) und Netzebenen mit Atomrümpfen (schwarz) sind dargestellt. Der BRAGG-Winkel ist der Winkel zwischen dem einfallenden Strahl und den Netzebenen der BRAGG-Reflexion. Der Abstand zwischen den Netzebenen ist d_H .

$$n\lambda_B = 2d_H(T) \sin(\theta_B) \quad (3.1) \quad d_H(T) = \frac{a_0(T)}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad (3.2)$$

mit der Gitterkonstante $a_0(T)$, dem Netzebenenabstand $d_H(T)$, der temperaturabhängig ist und n eine natürliche Zahl. Für Diamant beträgt die Gitterkonstante $a_0 = 3.560 \text{ \AA}$ (KITTEL, 1986, S. 20). Es werden nur Wellenlängen kleiner als $\lambda \leq 2d_H$ reflektiert. Die Formel Gl. 3.2 ist für kubische Gitter gültig. Die unterschiedlichen Netzebenenscharen können über die MILLERSchen Indizes (hkl) definiert werden (MILLER, 1839). MILLERSchen Indizes sind ganze, teilerfremde Zahlen. Reflexe höherer Ordnung sind möglich, indem die MILLERSchen Indizes mit dem Faktor der Ordnung multipliziert werden. Einige Reflexe sind verboten, da der Strukturfaktor (GUINIER, 1994, S. 16)

$$F_H = \sum_n f_n(\vec{H}) \exp\left(i\vec{H}\vec{r}_n - W_n(\vec{H})\right), \quad (3.3)$$

Null wird, obwohl der Reflex nach Gl. 3.1 erlaubt ist, wobei $f_n(\vec{H})$ die atomare Streuamplitude des n -ten Atoms der Einheitszelle mit dem Ortsvektor $\vec{r}_n$ ist. $\vec{H}$ beschreibt den reziproken Gittervektor. Der Term $\exp(2W_n)$ beschreibt den DEBYE-WALLER-Faktor (DEBYE, 1913; WALLER, 1923), der die thermischen Vibrationen als einen multiplikativen Faktor berücksichtigt. Die elektrische Suszeptibilität ist eine periodische Funktion, die die Symmetrie des Kristallgitters besitzt. Diese Funktion kann als eine FOURIER-Reihe aufgefasst werden

$$\chi(\vec{r}) = \sum_H \chi_H \exp\left(i\vec{H}\vec{r}\right) \quad (3.4) \quad \chi_H = -\frac{r_e F_H}{\pi V} \lambda^2, \quad (3.5)$$

mit FOURIER-Komponenten der Suszeptibilität χ_H . Darin sind $\vec{H}$ der reziproke Gittervektor, $\vec{r}$ der Ortsvektor, r_e der klassische Elektronenradius, V das Volumen der Einheitszelle und λ die Wellenlänge.

3.1.1. Änderung der Bragg-Wellenlänge mit der Temperatur

Der Netzebenenabstand d_H ist temperaturabhängig. Aus den intensiven Röntgenlichtpulsen eines XFELs und der aus der Absorption resultierenden Erwärmung des Kristalls folgt eine Änderung der BRAGG-Wellenlänge. In erster Näherung kann, ausgehend von Gl. 3.1, die hervorgerufene Wellenlängendifferenz berechnet werden, indem mit dem temperaturabhängigen linearen Wärmeausdehnungskoeffizienten $\alpha(T)$ (siehe Anhang: Abb. D.1) der Netzebenenabstand

modifiziert wird

$$\begin{aligned}
 \Delta\lambda &= 2d_H(T_1) \sin \theta_B - 2d_H(T_0) \sin \theta_B \\
 &\approx 2d_H(T_0) \left(1 + \int_{T_0}^{T_1} \alpha(T) dT \right) \sin \theta_B - 2d_H(T_0) \sin \theta_B, \text{ für } \frac{d_H(T_1) - d_H(T_0)}{d_H(T_0)} \ll 1 \\
 &= 2d_H(T_0) \int_{T_0}^{T_1} \alpha(T) dT \sin \theta_B \\
 \frac{\Delta\lambda}{\lambda} &= \int_{T_0}^{T_1} \alpha(T) dT,
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

wobei T_0 die Ausgangs- und T_1 die Endtemperatur sind. Die relative Änderung der Wellenlänge Gl. 3.6 ist nur vom Ausdehnungskoeffizienten $\alpha(T)$ der Netzebenen abhängig.

3.2. Dynamische Theorie der Röntgenbeugung an Kristallen

Die dynamische Theorie der Beugung von Röntgenstrahlen an periodischen Gittern ist notwendig, um die Eigenschaften der reflektierten Lichtwelle theoretisch beschreiben zu können. Das BRAGG-Gesetz lässt zum Beispiel keine Rückschlüsse auf die reflektierte Bandbreite, den Phasenverlauf oder die Eindringtiefe zu. Die dynamische Theorie der Röntgenbeugung an Kristallen ist von EWALD (1917) und VON LAUE (1931) entwickelt worden. Die hier aufgeführten Formeln der dynamischen Beugungstheorie beschreiben den Zwei-Strahl Fall (eine ein- und eine auslaufende Welle) und werden im Buch SHVYD'KO (2004) hergeleitet. Im Folgenden wird auf die explizite Herleitung der Formeln verzichtet.

3.2.1. Allgemeine Lösung des Gleichungssystems für zwei Strahlen

Die Lösung der Wellengleichung für das elektrische Feld im Kristall einer periodischen Elektronenverteilung ist eine Überlagerung von unendlich vielen ebenen Wellen mit einem Wellenvektor $\vec{k}_H = \vec{k}_0 + \vec{H}$

$$\vec{D}(\vec{r}) = \sum_H \vec{D}_H e^{i\vec{k}_H \vec{r}}, \tag{3.7}$$

wobei $\vec{H}$ der reziproke Gittervektor, $\vec{k}_H$ der gestreute Wellenvektor und $\vec{k}_0$ der Wellenvektor der einlaufenden Welle ist. Daraus lassen sich die fundamentalen Gleichungen der dynamischen Theorie ableiten, wenn diese in die Wellengleichung (MAXWELL, 1865) eingesetzt werden:

$$\frac{\vec{k}_H^2 - K_{\text{Abs}}^2}{K_{\text{Abs}}^2} \vec{D}_H = \sum_{H'} \chi_{H-H'} \vec{D}_{H'} \text{ oder} \tag{3.8}$$

$$\vec{D}_H = \frac{K_{\text{Abs}}^2}{\vec{k}_H^2 - K_{\text{Abs}}^2 (1 - \chi_0)} \sum_{H' \neq H} \chi_{H-H'} \vec{D}_{H'}. \tag{3.9}$$

An der Grenzfläche des Kristalls müssen die tangentialen Komponenten des Wellenvektors inner- und außerhalb des Kristalls gleich sein. Diese Korrekturen $\varkappa$ sind gegenüber dem Wellenvektor

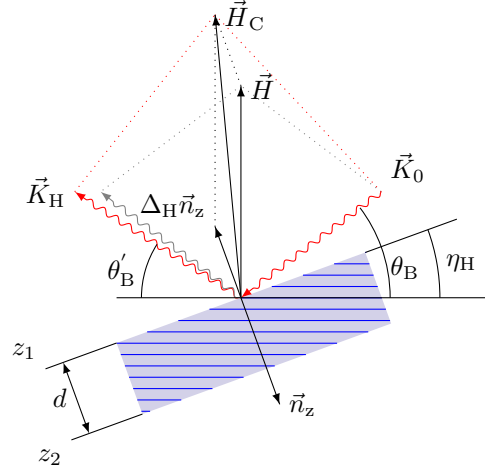


Abbildung 3.2.: Streugeometrie der BRAGG-Beugung. Der Kristall mit den an der Reflexion teilnehmenden Atomebenen ist in blau dargestellt. Ein einzelner Fall für einen einfallenden Strahl $\vec{K}_0$ und einem gebeugten Strahl $\vec{K}_H = \vec{K}_0 + \vec{H}_C$ mit $\vec{H}_C = \vec{H} + \Delta_H \vec{n}_z$ ist abgebildet. $\vec{H}_C$ ist der Gesamtimpulsübertrag, wobei der Impulsübertrag $\Delta_H \vec{n}_z$ durch die Beugung der Strahlung an der Grenzfläche zwischen Vakuum und Kristalloberfläche bedingt ist. Der Impulsübertrag $\Delta_H \vec{n}_z$ entspricht nicht realen Werten und ist für die Anschaulichkeit deutlich zu groß gewählt. $\vec{n}_z$ ist der Normalenvektor der Kristalloberfläche. In grau ist der gebeugte Strahl $\vec{K}_H = \vec{K}_0 + \vec{H}$ dargestellt. η_H ist der Asymmetriewinkel (SHVYD'KO, 2004, S. 43).

$\vec{k}_0 = \vec{K}_0 + \varkappa \vec{n}_z$ und $\vec{k}_H = \vec{K}_H + \varkappa_H \vec{n}_z$ klein, wobei $\vec{n}_z$ der Normalenvektor der Oberfläche des Kristalls ist, dessen Orientierung in den Kristall zeigt. Des Weiteren müssen die Beträge der Wellenvektoren innerhalb und außerhalb des Kristalls identisch bleiben $K_{\text{Abs}} := |\vec{K}_0| = |\vec{K}_H|$. Diese beiden Bedingungen an die Wellenvektoren beschreiben die Randbedingungen an der Grenzfläche zwischen Kristall und Vakuum. Diese können auch als Impuls- und Energieerhaltung verstanden werden. Aus beiden Bedingungen lässt sich der Impulsübertrag an der Grenzfläche zwischen Vakuum und Kristall bestimmen:

$$\Delta_H = K_{\text{Abs}} \left(-\gamma_H \pm \sqrt{\gamma_0^2 - \alpha_H} \right) \quad \Delta_H = \varkappa - \varkappa_H \quad (3.10)$$

mit

$$\gamma_H = \frac{(\vec{K}_0 + \vec{H}) \vec{n}_z}{K_{\text{Abs}}} \quad \gamma_0 = \frac{\vec{K}_0 \vec{n}_z}{K_{\text{Abs}}} \quad \alpha_H = \frac{2\vec{K}_0 \vec{H} + \vec{H}^2}{K_{\text{Abs}}^2}, \quad (3.11)$$

wobei γ_H und γ_0 den Kosinus der Richtung des gebeugten und einfallenden Strahls bezüglich des Normalenvektors $\vec{n}_z$ angeben. Der Streuparameter α_H beschreibt als Funktion des Betrags der Amplitude und der Richtung zwischen einlaufender Welle und reziprokem Gittervektor die „Stärke der Streuung“. In Abb.3.2 ist für einen speziellen Fall die Streugeometrie mit zusätzlichem Impulsübertrag dargestellt.

Durch Einsetzen von Gl. 3.11 und in Gl. 3.9 folgt für das elektrische Feld im Kristall (an dieser

Stelle sei auf die Herleitung in SHVYD'KO (2004) verwiesen)

$$\vec{D}_H = \frac{1}{\alpha_H - \chi_0 + 2\gamma_H \varkappa / K_{\text{Abs}} + \varkappa^2 / K_{\text{Abs}}^2} \sum_{H' \neq H} \chi_{H-H'} \vec{D}_{H'}. \quad (3.12)$$

Hieraus wird ersichtlich, dass nur Amplituden $\vec{D}_{H'}$ zur gestreuten Welle $\vec{D}_H$ beitragen, wenn der Streuparameter α_H klein ist. Damit lässt sich das fundamentale Gleichungssystem schreiben als

$$\sum_{H', s'} \left(\chi_{H-H'} P_{HH'}^{ss'} - \alpha_H \delta_{HH'}^{ss'} \right) \vec{D}_{H'} - \left(2\gamma_H \frac{\varkappa}{K_{\text{Abs}}} + \frac{\varkappa^2}{K_{\text{Abs}}^2} \right) \vec{D}_H = 0, \quad (3.13)$$

wobei $P_{HH'}^{ss'}$ der Polarisationsfaktor und $\delta_{HH'}^{ss'}$ der KRONECKER-Delta Operator für zwei Paare von Indizes sind. H beschreibt die Streugeometrie und s die Polarisation. Die Lösungen dieses Gleichungssystems können durch

$$\vec{D}(\vec{r}) = \sum_H e^{i(\vec{K}_0 - \vec{H})\vec{r}} \sum_\nu \Lambda_\nu \vec{D}_{H(\nu)} e^{i\varkappa_\nu z} \quad (3.14)$$

angegeben werden, wobei Λ_ν nachfolgend für einen speziellen Fall bestimmt wird. Die Grenzbedingungen für den BRAGG-Fall der Beugungstheorie sind durch

$$\vec{D}_0(z_1) = \vec{E}_i \quad \vec{D}_H(z_2) = 0 \quad (3.15)$$

gegeben, wobei z_1 die Oberfläche, z_2 die Rückseite des Kristalls und $\vec{E}_i$ die Amplitude des elektrischen Feldes der einlaufenden Welle an der Oberfläche des Kristalls, $\vec{D}_0$ das einlaufende Wellenfeld und $\vec{D}_H$ das gebeugte Wellenfeld sind. Die Reflektivität und Transmissivität sind definiert durch

$$R_B = |b_H|^{-1} \frac{|\vec{D}_H(z_1)|^2}{|\vec{E}_i|^2} \quad T_B = \frac{|\vec{D}_0(z_2)|^2}{|\vec{E}_i|^2}, \quad (3.16) \quad (3.17)$$

wobei $b_H = \gamma_0 / \gamma_H$ der Asymmetrieparameter ist, der den Winkel zwischen Kristalloberfläche und Kristallebenen berücksichtigt (für symmetrische Reflexionsgeometrie $b_H = -1$). Nun wird das Gleichungssystem auf zwei Strahlen reduziert:

$$\begin{pmatrix} \chi_0 - 2\gamma_0 \frac{\varkappa}{K_{\text{Abs}}} - \frac{\varkappa^2}{K_{\text{Abs}}^2} & \chi_H P_{0H}^{ss'} \\ \chi_H b_H P_{H0}^{ss'} & (\chi_0 - \alpha_H) b_H - 2\gamma_0 \frac{\varkappa}{K_{\text{Abs}}} - \frac{\varkappa^2}{K_{\text{Abs}}^2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} D_0^s \\ D_H^s \end{pmatrix} = 0, \quad (3.18)$$

wobei γ_0 die Streugeometrie des einfallenden Strahls beschreibt und im Weiteren für den Polarisationsfaktor $P_{0H}^{\sigma\sigma} = P_{H0}^{\sigma\sigma} = 1$ und $P_{0H}^{\pi\pi} = P_{H0}^{\pi\pi} = \cos 2\theta$ gilt.

Dieses Gleichungssystem hat nicht-triviale Lösungen, wenn die Determinante ungleich Null ist. Die Lösungen für das elektrische Feld im Kristall können angegeben werden durch

$$D(\vec{r}) = e^{i\vec{K}_0\vec{r}} \left(D_0(z) + D_H(z) e^{i\vec{H}\vec{r}} \right) \quad (3.19)$$

mit

$$D_0(z) = \sum_{\nu=1,2} \Lambda_\nu D_{0(\nu)} e^{i\kappa_\nu z} \quad D_H(z) = \sum_{\nu=1,2} \Lambda_\nu D_{H(\nu)} e^{i\kappa_\nu z} \quad (3.20)$$

und

$$\kappa_\nu = \varepsilon_\nu K_{\text{Abs}} / (2\gamma_0) \quad (3.21)$$

$$\varepsilon_\nu = \chi_0 - \tilde{\alpha} \pm \sqrt{\tilde{\alpha} + P_{\text{HH}}^{ss'2} b_H \chi_H \chi_{\bar{H}}} \quad (3.22)$$

$$\tilde{\alpha} = \frac{1}{2} (\alpha_H b_H + \chi_0 (1 - b_H)), \quad (3.23)$$

wobei ε_ν zwei Werte sind, um zwischen den beiden möglichen Lösungen zu unterscheiden. Das Pluszeichen entspricht dem Index $\nu = 1$ und der Imaginärteil der Wurzel (Gl. 3.22) ist positiv. Bei dieser Lösung wurde κ^2 wegen $\kappa^2 \ll \kappa$ vernachlässigt. Diese Vereinfachung ist zulässig für Strahlen, die weit vom streifenden Einfall bzw. Austritt entfernt sind. Die Werte der Gleichung für Λ_ν werden durch die Grenzbedingungen Gl. 3.15 bestimmt. Die Transmissions- und Reflexionsamplituden (t_{00} , r_{0H}) lassen sich dann für den Fall der einfallenden Welle auf der Vorderseite des Kristalls in folgender Form schreiben:

$$t_{00} = e^{i\kappa_1 d} \frac{R_2 - R_1}{R_2 - R_1 e^{i(\kappa_1 - \kappa_2)d}} \quad (3.24)$$

$$r_{0H} = R_1 R_2 \frac{1 - e^{i(\kappa_1 - \kappa_2)d}}{R_2 - R_1 e^{i(\kappa_1 - \kappa_2)d}} \quad (3.25)$$

$$R_{1,2} = \frac{\varepsilon_{1,2} - \chi_0}{\chi_{\bar{H}}}, \quad (3.26)$$

wobei d die Kristalldicke ist. Die Reflektivität und Transmission vereinfachen sich dann zu

$$R_B = \frac{1}{b_H} |r_{0H}|^2 \quad (3.27)$$

$$T_B = |t_{00}|^2. \quad (3.28)$$

3.2.2. Korrektur für das Bragg-Gesetz

Aufgrund der Brechung des Lichts an der Grenzfläche zwischen Kristall und Vakuum muss eine kleine Korrektur eingeführt werden. Für symmetrische Streugeometrie kann die Korrektur zum BRAGG-Gesetz Gl. 3.1 und das modifizierte BRAGG-Gesetz wie folgt formuliert werden

$$w_H = -2 \operatorname{Re}(\chi_0) \frac{d_H^2}{\lambda^2} \quad (3.29) \quad \lambda_c = \frac{2d_H}{1 + w_H} \sin \theta_B. \quad (3.30)$$

Diese Korrekturen stammen aus der dynamischen Theorie. Das BRAGG-Gesetz berechnet nur einen Winkel und eine Wellenlänge. Im Fall der dynamischen Theorie werden Wellenlängen und Winkel um den BRAGG-Winkel und um die Zentralwellenlänge reflektiert. Die Winkel- und spektrale Breite der BRAGG-Reflexion sind für den symmetrischen Fall gegeben durch

$$\Delta\theta = \epsilon_H \tan \theta_B \quad (3.31) \quad \epsilon_H = \frac{4r_e d_H^2}{\pi V} |P_{\text{HH}}^{ss'} F_H|. \quad (3.32)$$

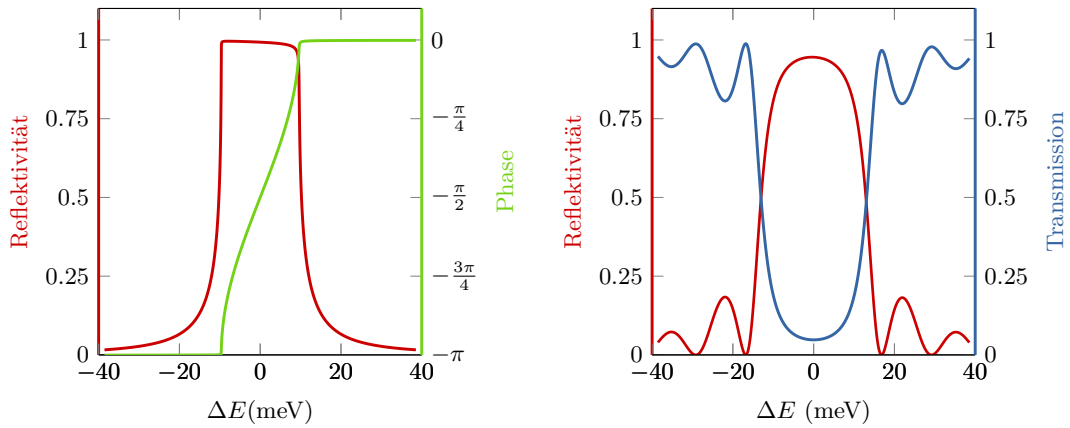


Abbildung 3.3.: Reflexion in Abhängigkeit von der Photonenenergie für Diamant (444) in Rückstreuung für ideale Kristalle mit Absorption. Links: Reflektivität und Phase eines dicken Diamantkristalls. Rechts: Reflektivität und Transmission eines $d_{\text{Krit}} = 42 \mu\text{m}$ dicken Diamantkristalls.

Die spektrale Breite der BRAGG-Reflexion wird auch DARWIN-Breite genannt und ist mit den an der BRAGG-Reflexion teilnehmenden Netzebenen N_{NE} verknüpft (SHVYD'KO, 2004, S. 77)

$$\epsilon_{\text{H}} = \frac{1}{\pi N_{\text{NE}}}.$$

3.3. Lösung für Diamant-Kristalle

Die Abbildung 3.3 zeigt die Reflektivität eines Diamantkristalls mit der Orientierung (444) für zwei unterschiedliche Kristalldicken. Auf der Ordinate ist die Energiedifferenz der Photonenenergie von der korrigierten Photonenenergie $\Delta E = E_{\text{Phot}} - h_{\text{p}}c_0/e/\lambda_c$ aufgetragen. In der linken Abbildung ist die Reflektivität eines dicken Kristalls und der Phasenverlauf in Abhängigkeit von der Photonenenergie dargestellt. In der rechten Abbildung ist die Reflektivität und Transmission eines $40 \mu\text{m}$ dünnen Diamantkristalls gezeigt, wie er zur Auskopplung von Strahlung aus dem Resonator genutzt werden kann. Für den dünnen Kristall sind an den Flanken weitere lokale Maxima zu erkennen, die auftreten, da eine weitere Randbedingung an der Rückseite des Kristalls erfüllt werden muss.

In Abbildung 3.4 ist die Reflektivität von Diamant für unterschiedliche Kristallorientierungen dargestellt, wie sie in den numerischen Berechnungen in Kapitel 6 mit GINGER genutzt werden. Diese Kombination ist für das Programm GINGER notwendig, welches nur eine Datei mit den Eigenschaften des spektralen Filters einlesen kann. Außerdem ist die Anwendung eines Filters im Frequenzraum nur eine Multiplikation der beiden komplexen Transferfunktionen, die an einer Stelle im Resonator hinter den Linsen auf das Strahlungsfeld angewendet wird. Aufgrund des Kommutativgesetzes ist die Reihenfolge der Anwendung der verschiedenen Transferfunktionen auf das Feld unerheblich. Somit können die Eigenschaften der beiden BRAGG-Kristalle vorweg zusammengefasst werden. Die Resonatorkonfigurationen sind in Kapitel 5 und die numerischen Simulationen in Kapitel 6 näher erläutert. Die dargestellte Reflektivität ist die Kombination aus zwei Transferfunktionen, einem dickeren Kristall ($d_{\text{Krit}} = 150 \mu\text{m}$) und einem dünneren Kristall

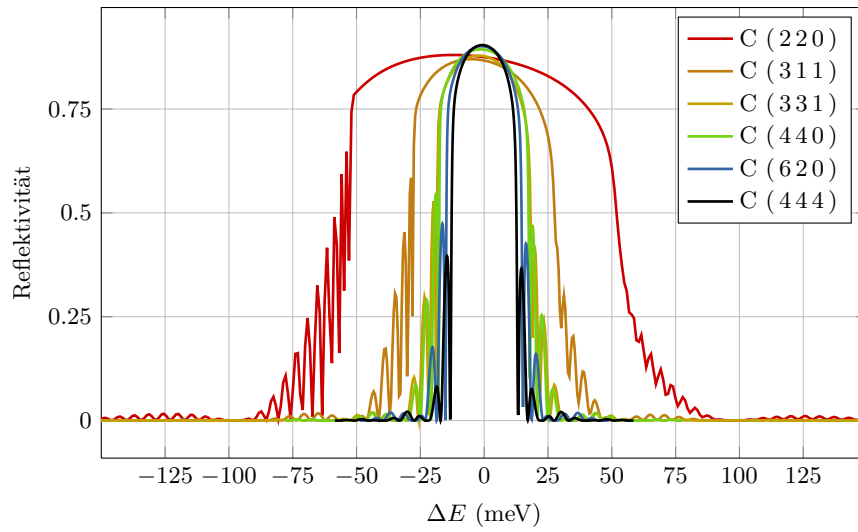


Abbildung 3.4.: Reflektivität in Rückstreuung für zwei kombinierte Diamantkristalle unterschiedlicher Dicke (siehe Tab. 3.1) und unterschiedlichen MILLERSchen Indizes.

Tabelle 3.1.: Wellenlängen der BRAGG-Beugung.

Reflex	$\lambda_{\text{Rad}}(\text{\AA})$	$d_{\text{Krist}}(\mu\text{m})$
C (220)	2.52	7.50
C (311)	2.15	14.0
C (331)	1.64	21.0
C (440)	1.26	22.0
C (620)	1.13	27.0
C (444)	1.03	42.0

zur Auskopplung der Strahlung. In Tab. 3.1 sind die Parameter der Kristalle aufgelistet. Die Phase der Transferfunktionen ist angepasst, sodass die Eindringtiefe in den Kristall kompensiert wird (LINDBERG *et al.*, 2011)

$$r_{0H}' = r_{0H} \cdot \exp(-i\phi_{\text{Ext}}) \quad (3.33)$$

$$\phi_{\text{Ext}} = -\frac{\alpha_H + 2\chi_0}{2|\chi_H|}. \quad (3.34)$$

Die angepasste Phase ändert nicht die Reflektivität. Sie gleicht nur den Phasenvorschub, der durch den BRAGG-Kristall hinzukommt, aus, sodass die Länge des Resonators so gewählt werden kann, als würde der BRAGG-Kristall keinen Einfluss auf die Länge des Resonators selbst haben.

3.4. Absorption und Eindringtiefe

Für die Untersuchung der Wärmeentwicklung in Kristallen nach Absorption eines Anteils des Röntgenlichtpulses ist es notwendig, die Eindringtiefe des Lichts in den Kristall zu bestimmen.

Für den Fall von Photonenenergien, die weit von der BRAGG-Reflexion entfernt sind, ist die Absorption durch den Imaginärteil der elektrischen Suszeptibilität bestimmt. Drei Haupteffekte tragen zur Dämpfung von Licht in Materie bei (vgl. AUTHIER, 2001, S. 41 ff):

- photoelektrische Absorption
- inelastische Streuung: COMPTON-Streuung
- inelastische Streuung: thermisch diffuse Streuung beschrieben durch den DEBYE-WALLER-Faktor

Die photoelektrische Absorption hat den größten Anteil an der Dämpfung des Lichtes.

Die Eindringtiefe im Bereich der BRAGG-Reflexion kann durch die DARWIN-Breite abgeschätzt werden. Je schmaler das Frequenzband ist, welches reflektiert wird, desto größer ist die Anzahl N_{NE} der Netzebenen, die an der Reflexion teilnehmen

$$l_{\text{Ext}} \approx d_{\text{H}} N_{\text{NE}}. \quad (3.35)$$

Die Winkel- und Energieabhängigkeit der Eindringtiefe im Bereich der BRAGG-Reflexion ist gegeben durch (SHVYD'KO, 2004, S. 65)

$$l_{\text{Ext}} = \text{Im}(\kappa_1)^{-1}. \quad (3.36)$$

Dies kann aus Gl. 3.26 entnommen werden. Die Abhängigkeit der Eindringtiefe der Strahlung in den Kristall von der Photonenenergie für einen Diamantkristall des Reflexes (444) bei $E_{\text{Phot}} \approx 12 \text{ keV}$ ist in Abb. 3.5 (links) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass sich für Photonenenergien, die weit entfernt sind von der reflektierten Photonenenergie die Eindringtiefe in den Kristall an die Photoabsorptionslänge annähert. Für $\Delta E < 0$ ist die Eindringtiefe des Lichts größer als die Photoabsorptionslänge. In diesem Fall sind die Maxima der Amplitude der stehenden Lichtwelle im Kristall (BLOCH-Welle) zwischen den Atomen im Kristall lokalisiert (innerhalb des Kristalls bildet sich eine stehende Welle in Richtung des Normalenvektors der Netzebenen aus und senkrecht dazu eine laufende Welle). Die Absorption für diese Lichtwelle ist kleiner. Die Absorption der Lichtwellen, deren Maxima der Amplitude an den Atomen lokalisiert sind, was sich durch eine geringere Eindringtiefe als die Photoabsorptionslänge ($\Delta E > 0$) zeigt, ist größer. Die Photoabsorptionslänge und die BRAGG-Extinktionslänge am Maximum der Reflektivität kann alternativ wie folgt formuliert werden (STEPANOV, 2012):

$$l_{\text{Abs}} = \frac{\lambda}{2\pi|\chi_0|} \quad (3.37) \quad l_{\text{Ext}} = \frac{\lambda_c \sin(\theta_{\text{B}})}{\pi\sqrt{|\chi_{\text{H}}\chi_{\bar{\text{H}}}|}}. \quad (3.38)$$

In Abb. 3.5 (rechts) sind für verschiedene Orientierungen von Diamantkristallen und einem BRAGG-Winkel von $\theta_{\text{B}} = \pi/2$ die Photoabsorptionslänge und die BRAGG Extinktionslänge gegen die Photonenenergie aufgetragen. Die Photoabsorptionslänge steigt kontinuierlich mit der Photonenenergie an. Die Eindringtiefe l_{Ext} nimmt für verschiedene Kristallorientierungen in Rückstreuung mit der Photonenenergie zu, aber nicht stetig. Das ist auf die unterschiedlichen Strukturparameter Gl. 3.3 für die verschiedenen Kristallorientierungen zurückzuführen.

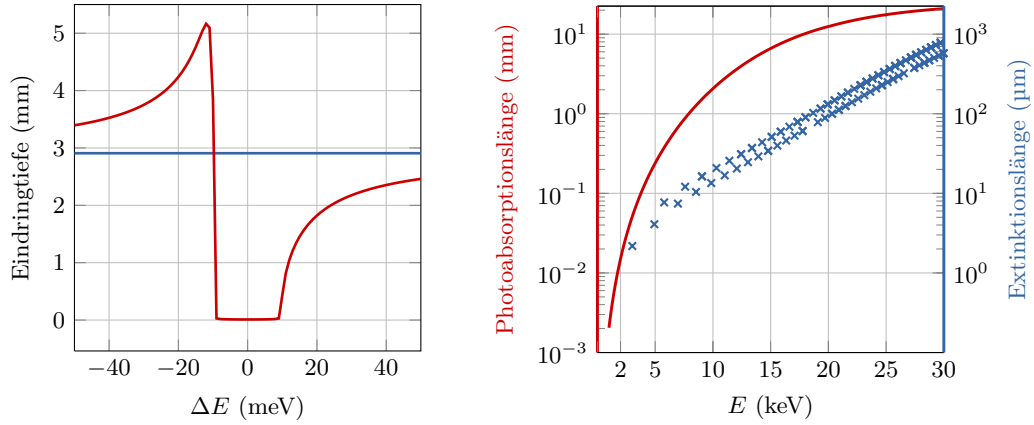


Abbildung 3.5.: Links: Eindringtiefe im Bereich der BRAGG-Reflexion in Abhängigkeit von der Photonenenergie (rot) für einen Diamantkristall mit der Orientierung (444). Zusätzlich ist die Photoabsorptionslänge für $E_{\text{Phot}} \approx 12$ keV (blau) als Konstante eingezeichnet. Rechts: Photoabsorptionslänge und Eindringtiefe der BRAGG-Reflexion für Diamant unterschiedlicher BRAGG-Reflexe in Rückstreuung in Abhängigkeit von der Photonenenergie.

Aus dieser Betrachtung wird deutlich, dass der Temperatursprung nach Absorption der gleichen Energiemenge für niedrigere Photonenenergien deutlich höher sein wird, da die Leistungsdichte aufgrund des kleineren Volumens, in dem das Licht absorbiert wird, größer ist. Außerdem ist der große Unterschied zwischen Photoabsorptionslänge und der Eindringtiefe des Lichts im Bereich der BRAGG-Reflexion deutlich. Somit wird der Kristall bei Absorption eines von einem BRAGG-Kristall monochromatisierten Lichtpuls eines XFELs nur wenige $10 \mu\text{m}$ in den Kristall eindringen und dort Energie deponieren, was zu der Erwärmung des Kristalls in der oberen Schicht des Kristalls führt. Die spontane Undulatorstrahlung mit einem breiteren Spektrum dringt tiefer in den Kristall ein und wird eine in der Tiefe nahezu konstante Temperaturänderung hervorrufen.

Messungen, wie sie auch in dem Buch von SHVYD'KO (2004) zu finden sind, zeigen eine hohe Übereinstimmung der dynamische Theorie der RÖNTGEN-Beugung an Kristallen für nahezu perfekte Kristalle. Das Verständnis der RÖNTGEN-Beugung ist notwendig, um einen XFEL aufzubauen. Die thermische Entwicklung in BRAGG-Kristallen ist nur durch die Berechnung der Eindringtiefe und der wellenlängenabhängigen Absorption zu verstehen.

4. Grundlagen zur Temperaturentwicklung in Festkörpern

Wie aus dem vorangegangenen Kapitel ersichtlich wird, ist die BRAGG-Reflexion temperaturabhängig. Da ein XFEL einen sehr intensiven Lichtpuls generiert, sind thermische Berechnungen nötig, um die Änderung der BRAGG-Wellenlänge zu berechnen. Zu Beginn wird eine Einleitung in die Wärmeleitung in Festkörpern gegeben. Anschließend wird ein analytischer Ansatz zur Lösung der Wärmeleitungsgleichung verfolgt. Zuletzt wird ein numerisches Verfahren erläutert, welches im Rahmen dieser Arbeit für die Berechnung der Temperatur in Kristallen genutzt wird.

4.1. Einführung

In Festkörpern gibt es unterschiedliche elementare Anregungen, wie zum Beispiel elektronische, photonische und phononische, um die geläufigsten zu nennen (vgl. KITTEL, 1986, S. 82). Der Wärmetransport in kristallinen Festkörpern wird hauptsächlich durch phononische Anregungen getragen (MAJUMDAR, 1993). Die Absorption elektromagnetischer Strahlung in Halbleitern/Isolatoren regen Valenzelektronen und optische Phononen an (QIU *et al.*, 1993).

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Phononen im Kristall ist durch die Dispersionsrelation gegeben. Da sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit der akustischen Phononen über einen sehr großen Frequenzbereich kaum ändert, kann diese als konstant angesehen werden (McSKIMIN *et al.*, 1972). Dieser Transportprozess der Phononen kann mikroskopisch mit der BOLTZMANN-Transportgleichung beschrieben werden (vgl. ZIMAN, 2001; KITTEL, 1986, S. 264 ff u. S. 617 ff)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \dot{\vec{v}} \cdot \vec{\nabla}_v f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Streu}}, \quad (4.1)$$

wobei $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ die Teilchenverteilungsfunktion in Abhängigkeit vom Ort $\vec{r}$, der Geschwindigkeit $\vec{v}$, der Zeit t und der Beschleunigung des Teilchens $\dot{\vec{v}}$ ist. Die NABLA-Operatoren $\vec{\nabla}_r, \vec{\nabla}_v$ bilden die Ableitungen bezüglich der Orts- bzw. der Geschwindigkeitskoordinaten. Die Abhängigkeit von der Geschwindigkeit $\vec{\nabla}_v f$ ist klein und wird im Folgenden nicht mehr berücksichtigt $f(\vec{r}, \vec{v}, t) = f(\vec{r}, t)$ (MAJUMDAR, 1993). Der zweite Term beschreibt die advektive Strömung der Verteilung. Die rechte Seite der Gleichung beschreibt die Änderung der Verteilung f aufgrund von Streuung. Der Streuterm kann mit der Relaxationszeit-Näherung genähert werden (vgl. KITTEL, 1986, S. 619)

$$\frac{\partial f_\omega}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f_\omega = \frac{f_\omega^0 - f_\omega}{\tau_R}, \quad (4.2)$$

mit f_ω der Verteilungsfunktion in Abhängigkeit von der Phononfrequenz ω und der Gleichgewichtsverteilungsfunktion f_ω^0 der Phononen, welche der BOSE-EINSTEIN-Statistik folgt. τ_R ist die mittleren Zeitspanne zwischen zwei Streueignissen. Aus der Verteilungsfunktion f_ω lässt

sich über die Summation der Phononen und deren Geschwindigkeiten $\vec{v}$ der Wärmefluss $\dot{Q}$ bestimmen, die mit der Zustandsdichte der Phononen $D(\omega)$ in eine Integralform gebracht werden kann

$$\dot{Q}(\vec{r}, t) = \sum_k \hbar \omega_k \vec{v}(\vec{k}) f_k(\vec{r}, t) = \int \hbar \omega \vec{v}_s D(\omega) f_\omega(\vec{r}, t) d\omega. \quad (4.3)$$

Im Gleichgewichtszustand $\partial f_\omega / \partial t = 0$ vereinfacht sich Gl. 4.2 in der ersten Ordnung zu

$$f^1 \approx f^0 - \vec{v} \tau_R \vec{\nabla}_r f^0 \text{ mit } \vec{\nabla}_r f = \vec{\nabla}_r f^0. \quad (4.4)$$

Dies entspricht dem Wärmefluss $\dot{Q}$ nach dem FOURIERSchen Gesetz (FOURIER, 1822, S. 136)

$$\dot{Q} = -\lambda_C \vec{\nabla} T \text{ mit} \quad (4.5)$$

$$\lambda_C = \int \tau_R |\vec{v}|^2 \hbar \omega D(\omega) \frac{\partial f^0}{\partial T} d\omega = C_V v_S l_{\text{mfp}}, \text{ wobei} \quad (4.6)$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \int \hbar \omega D(\omega) \frac{\partial f^0}{\partial T} d\omega, \quad (4.7)$$

mit λ_C der stoffspezifischen Wärmeleitfähigkeit und C_V der Wärmekapazität bei konstantem Volumen. Die Schwierigkeit in der Berechnung der stoffspezifischen Wärmeleitfähigkeit liegt in der Bestimmung der mittleren freien Weglänge (ZIMAN, 2001, S. 288). Die Näherung $\partial f_\omega / \partial t = 0$ ist gültig, wenn die mittlere freie Weglänge l_{mfp} kleiner ist als die Dicke L des betrachteten Körpers $l_{\text{mfp}} \ll L$. Ist die mittlere freie Weglänge in der Größenordnung der Dicke des betrachteten Körpers, kann nicht mehr von diffusiver Wärmeleitung ausgegangen werden, da zwischen den beiden betrachteten lokalen Wärmereservoirs einige Phononen ohne Wechselwirkung in das benachbarte lokale Wärmereservoir gelangen können. Dieser Prozess des wechselwirkungsfreien Übergangs wird als Strahlungsübergang oder ballistischer Transport bezeichnet (CASIMIR, 1938; JOSHI *et al.*, 1993).

Die Wärmeleitung von Diamant ist gut untersucht, sodass daraus die mittlere freie Weglänge nach Gl. 4.6 bestimmt werden kann (EFIMOV *et al.*, 1999; BERMAN *et al.*, 1975; CHILDS *et al.*, 1973). Der Energieübertrag für die verschiedenen Grenzfälle ist nach JOSHI *et al.* (1993):

$$\text{Diffusiver Transport} \quad \dot{Q} \propto \lambda_C (T_1 - T_2) \quad l_{\text{mfp}} \ll L$$

$$\text{Diffusiver ballistischer Transport} \quad \dot{Q} \propto \frac{\sigma_{\text{SB}} (T_1^4 - T_2^4)}{3/4L/l_{\text{mfp}} + 1} \quad l_{\text{mfp}} \approx L$$

$$\text{Ballistischer Transport} \quad \dot{Q} \propto \sigma_{\text{SB}} (T_1^4 - T_2^4) \quad l_{\text{mfp}} \gg L,$$

$$\text{mit } \sigma_{\text{SB}} = \frac{\pi^2}{40} \frac{k_B}{\hbar^3 v_s^3},$$

wobei k_B die BOLTZMANN-Konstante, $\hbar$ das normierte PLANCKsche Wirkungsquantum und T_i , $i = 1, 2$ die Temperatur der beiden betrachteten Wärmereservoirs sind. In Kap. 7 wird eine Näherung des ballistisch diffusiven Wärmetransports genutzt (MAJUMDAR, 1993) und die

Wärmeleitung gemäß

$$\lambda_{\text{Eff}} = \frac{\lambda_{\text{C}}}{1 + \frac{4}{3} \frac{l_{\text{mfP}}}{L}} \quad (4.8)$$

korrigiert.

4.2. Analytische Beschreibung des Wärmetransports

Um den Wärmetransport analytisch nach dem FOURIERSchen Gesetz zu beschreiben, wird vom Wärmeleitungsgesetz ausgegangen (vgl. BAIERLEIN, 1999, S. 368 ff):

$$\dot{Q} = \frac{\lambda_{\text{C}}(T)}{r_{1,2}} A (T_1 - T_2), \quad (4.9)$$

mit $\lambda_{\text{C}}(T)$ der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit, $r_{1,2}$ dem Abstand zwischen den beiden betrachteten Wärmereservoirs und A der Querschnittsfläche. Die Temperaturverteilung kann durch Einführung der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck c_{P} und der Dichte ρ als Diffusionsgleichung geschrieben werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} T(t, \vec{r}) - \frac{1}{\rho c_{\text{P}}(T)} \vec{\nabla} \left(\lambda_{\text{C}}(T) \cdot \vec{\nabla} T(t, \vec{r}) \right) = T_{\text{Ext}}(t, \vec{r}), \quad (4.10)$$

wobei $T(t, \vec{r})$ die Temperaturverteilung im Kristall ist. $T_{\text{Ext}}(t, \vec{r})$ ist eine Temperaturverteilung, die eine Anregung des Systems beschreibt.

4.2.1. Gauss-förmige Temperaturverteilung

Die Temperaturverteilung im Kristall wird durch Gl. 4.11 beschrieben (vgl. SINN, 2006), wobei T_{max} durch die absorbierte Energie im Kristall berechnet werden kann

$$\begin{aligned} T(x, y, z) &= T_{\text{max}} \cdot \exp \left(- \left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right) - \frac{z}{l_{\text{Abs}}} \right) \\ Q &= \int_V c_{\text{P}}(T) \rho T(x, y, z) dV \\ T_{\text{max}} &= \frac{Q}{2\pi c_{\text{P}} \rho \sigma_x \sigma_y l_{\text{Abs}}}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Da die spezifische Wärmekapazität temperaturabhängig ist, muss der Mittelwert der spezifischen Wärmekapazität über den Temperaturanstieg ΔT gebildet werden, um den Wert für den Temperaturanstieg zu erhalten:

$$c_{\text{P,m}} = \frac{1}{\Delta T} \int_{T_0}^{T_0 + \Delta T} c_{\text{P}}(T) dT. \quad (4.12)$$

4.2.2. Lösung der Wärmeleitungsgleichung

Die Lösung der Wärmeleitungsgleichung mit konstanter thermischer Diffusion

$$a = \frac{\lambda_C}{\rho c_P} \quad (4.13)$$

kann mit Hilfe der Fundamentallösung der Wärmeleitungsgleichung gelöst werden (DZIUK, 2010, S. 183 ff). Die Fundamentallösung ist gegeben durch

$$I(t, \vec{r}) = \frac{1}{(4\pi at)^{\frac{n}{2}}} \cdot \exp\left(-\frac{\|\vec{r}\|^2}{4at}\right), \quad (4.14)$$

wobei n die Dimension und $\|\vec{r}\|^2$ die euklidische Norm sind.

Zum Zeitpunkt $t = 0$ wird die Temperaturverteilung vorgegeben (Gl. 4.15). Die Temperaturverteilung zum Zeitpunkt $t \geq 0$ kann durch Faltung der Fundamentallösung mit der Temperaturverteilung bestimmt werden (Gl. 4.16)

$$T(0, \vec{r}) = T_0 \exp\left(-\frac{r^2}{\sigma_R^2}\right) \quad (4.15)$$

$$T(t, \vec{r}) = (I * T_0)(t, \vec{r}) = \frac{T_0 \sigma_R^2}{(2at + \sigma_R^2)} \exp\left(-\frac{r^2}{\sigma_R^2}\right). \quad (4.16)$$

Führt man t_0 als

$$t_0 = \frac{\sigma_R^2}{2a} \quad (4.17)$$

ein, so ergibt sich für die Temperaturverteilung bei $r = 0$

$$T(t) = \frac{T_0}{1 + t/t_0}. \quad (4.18)$$

Um den Temperaturanstieg beim Auftreffen eines Pulszugs zu berechnen, wird die Temperatur zum Zeitpunkt der erneuten Absorption eines Teils des Lichtpulses $T(t_{\text{Sep}})$ zu T_{max} addiert. Nach einer weiteren Zeitspanne t_{Sep} wird die oben beschriebene Prozedur wiederholt. Damit die Erwärmung des gesamten Kristalls berücksichtigt wird, wird der Temperaturanstieg des gesamten Kristalls nach Absorption von $(n - 1) \cdot Q$ zusätzlich addiert, wobei n die Anzahl der absorbierten Pulse ist. Unter der Annahme der in Tab. 4.1 aufgeführten Parameter und nach Gl. 4.18 berechneten Temperaturentwicklung im Kristall, ergibt sich ein Temperaturanstieg von $\Delta T = 0.6 \text{ K}$ für eine Kristalltemperatur von $T_0 = 50 \text{ K}$ bzw. $\Delta T = 70.0 \text{ K}$ für eine Kristalltemperatur von $T_0 = 300 \text{ K}$. Bei dieser Berechnung wurde der Wärmefluss aus dem Kristall gleich Null gesetzt. Der Kristall erwärmt sich also langsam über den berechneten Pulszug. Die zeitlichen Temperaturentwicklungen für beide Kristalltemperaturen sind in Abb. 4.1, 4.2 dargestellt. Wie aus den Abbildungen zu erkennen ist, ist der Unterschied der Wärmeleitfähigkeit zwischen $T_0 = 300 \text{ K}$ und $T_0 = 50 \text{ K}$ entscheidend dafür, dass die Temperatur im Kristall nach der Zeitspanne t_{Sep} wieder nahe der Ausgangstemperatur T_0 ist.

Tabelle 4.1.: Parameter für analytische Berechnung der Temperaturentwicklung im Kristall.

T_0	K	50	300
$T_{\max}$	K	90	2.1
T_{Equ}	K	50.40	370.0
a	m^2/s	1.38	$8.15 \cdot 10^{-4}$
c_P	$\text{J g}^{-1} \text{K}^{-1}$	0.0031	0.511
λ_C	$\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-1}$	100.8	14.7
Q_{Abs}	mJ	2.0	5.0
σ_R	m	39.0	86.0
t_{Sep}	ns	222	

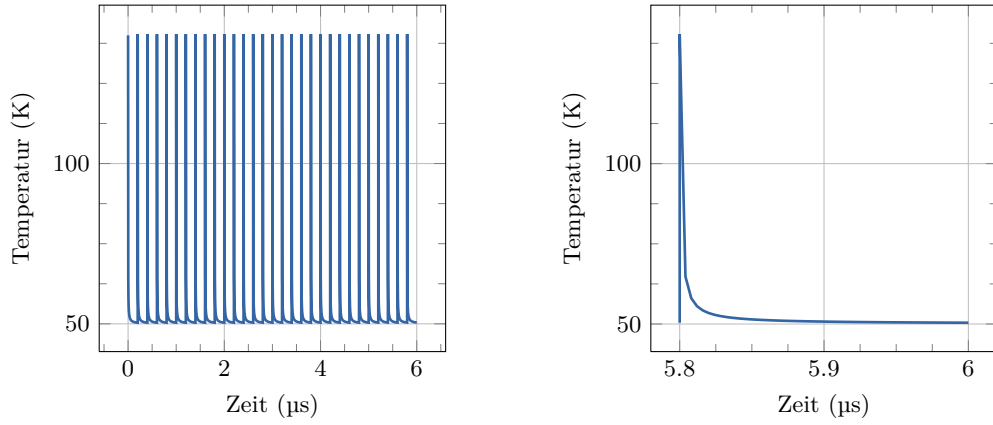


Abbildung 4.1.: Analytische Lösung des zeitlichen Temperaturverlaufs eines $d_{\text{Krist}} = 100 \mu\text{m}$ dicken Diamantkristalls mit einer Temperatur von $T_0 = 50 \text{ K}$. Links: Zeitlicher Temperaturverlauf von 10 Pulsen mit einem Pulsabstand von $t_{\text{Sep}} = 222 \text{ ns}$. Rechts: Zeitlicher Temperaturverlauf des letzten simulierten Pulses.

Die in der Lösung der Wärmeleitungsgleichung angenommene konstante Diffusion a entspricht nicht den realen Voraussetzungen. Die analytische Herleitung einer Formel für die Berechnung der zeitlichen Entwicklung der Temperaturverteilung im Kristall mit einer temperaturabhängigen Wärmeleitung ist nur eingeschränkt möglich und wird im Weiteren nicht weiter verfolgt.

Numerische Berechnungen haben wegen der nicht GAUSS-förmigen Temperaturverteilung nach Absorption weiterer Pulse mehr Freiheiten bei der Beschreibung des Problems. Außerdem können beliebige Formen des Kristalls berücksichtigt werden.

Das wichtigste Resultat der analytischen Betrachtung ist, dass der Temperaturanstieg eines Diamantkristalls mit einer Temperatur von $T_0 = 300 \text{ K}$ eine Änderung der reflektierten Wellenlänge bewirkt, die größer ist, als die Bandbreite der BRAGG-Reflexion (vgl. Gl. 3.6 und Gl. 3.32). Der Wärmefluss aus der analytischen Betrachtung wird in der hier vorgestellten analytischen Form überschätzt.

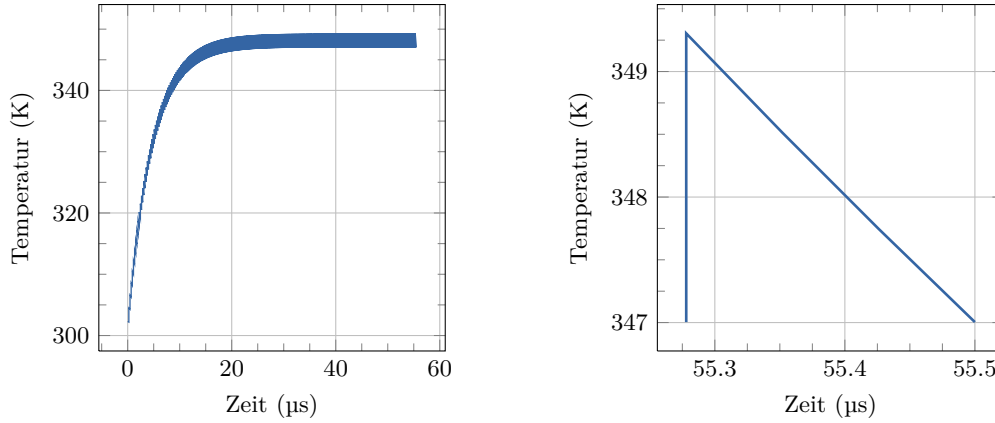


Abbildung 4.2.: Analytische Lösung des zeitlichen Temperaturverlaufs eines $d_{\text{Krist}} = 100 \mu\text{m}$ dicken Diamantkristalls mit einer Temperatur von $T_0 = 300 \text{ K}$. Links: Zeitlicher Temperaturverlauf von 300 Pulsen mit einem Pulsabstand von $t_{\text{Sep}} = 222 \text{ ns}$. Rechts: Zeitlicher Temperaturverlauf des letzten simulierten Pulses.

4.3. Numerische Lösung des Wärmetransports

Zur numerischen Berechnung der Temperaturentwicklung im Kristall wurde ein Programm in Interactive Data Language (IDL) entwickelt, welches den Wärmetransport in einem Kristall für einen zylindersymmetrischen Körper berechnet unter Berücksichtigung des ballistischen Wärmefflusses. Eine weitere Version berechnet nur den radialen Wärmeffluss. Die partiellen Ableitungen werden mit dem expliziten EULER-Verfahren numerisch berechnet (EULER, 1792). Die Fehler, die durch dieses Verfahren bei der Berechnung der Ableitung auftreten, sind für die erste Ableitung in der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta q)$ und für die zweite Ableitung in der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta q^2)$, wobei Δq der Integrationsschritt ist. In Abb. 4.3 ist der Ablauf des Programms dargestellt. Nachstehend sind Berechnungsschritte des Programms näher erläutert.

4.3.1. Gitter

Das Gitter, welches den Kristall unterteilt, ändert den Abstand zum Nachbarelement quadratisch in radialer Richtung bzw. in der Tiefe des Kristalls. Für Gitter mit konstantem Abstand der Gitterelemente ist entweder die Auflösung zu klein, um das Absorptionsprofil genau genug abzubilden oder die Anzahl der Gitterpunkte ist sehr groß, um Kristallgrößen im Bereich von Millimetern zu simulieren. Ein derart großes Gitter führt zu erheblich mehr Rechenaufwand. Des Weiteren ist die hohe Auflösung am Rand des Kristalls unnötig. Eine schematische Darstellung des Gitters und des simulierten Kristalls ist in Abb. 4.4 gezeigt. Die typische Anzahl der Gitterelemente liegt bei 50×50 Punkten.

4.3.2. Initiales Temperaturfeld

Der folgende Schritt im Programm ist die Berechnung des Temperaturfeldes an jedem Gitterpunkt zum Zeitpunkt $t = 0$ nach Absorption des Pulses. Es gibt die Möglichkeit, das Temperaturfeld zweier Pulse mit unterschiedlichen Strahlgrößen und Absorptionslängen zu berechnen.

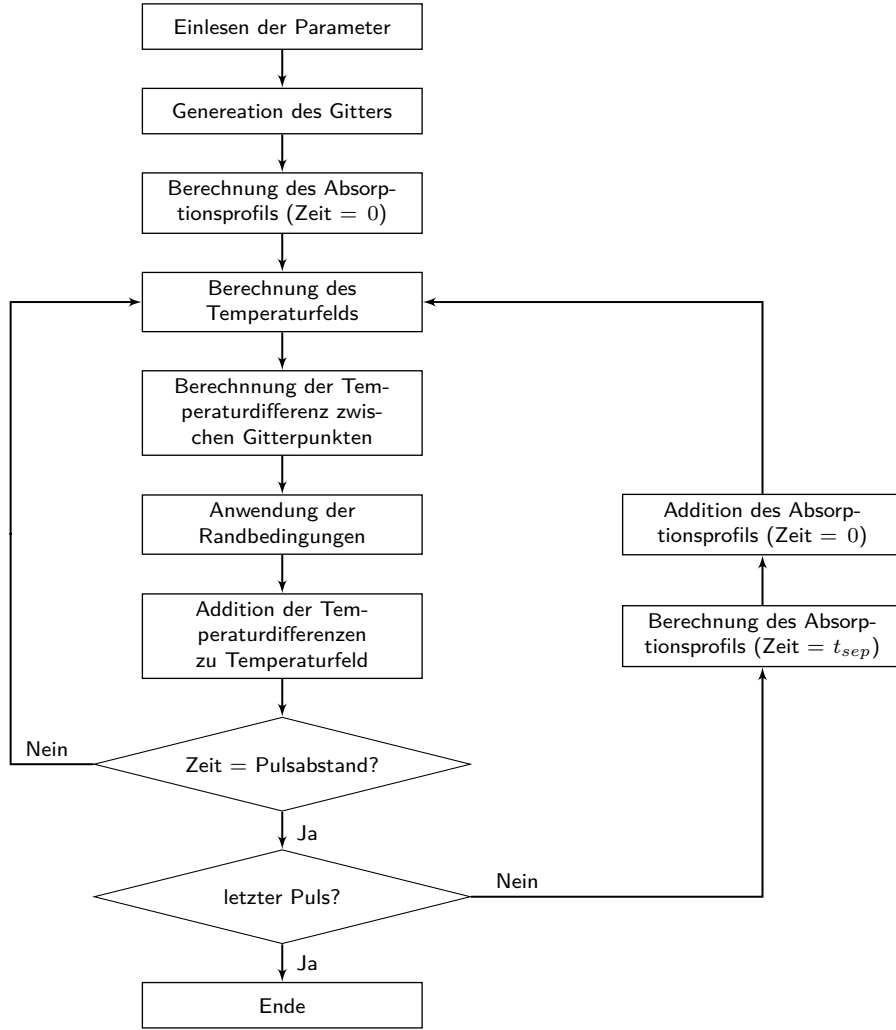


Abbildung 4.3.: Schematischer Ablauf der numerischen Berechnung des Wärmeflusses.

Die absorbierte Energie der Pulse wird als GAUSSförmig angenommen. Zuerst wird die absorbierte Energiedichte pro Gitterelement über

$$Q_{\text{Element}} = \frac{Q_{\text{Puls}}}{2\pi\sigma_R^2 l_{\text{Abs}}} \int_{z_1}^{z_2} \int_0^{2\pi} \int_{r_1}^{r_2} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma_R^2} - \frac{z}{l_{\text{Abs}}}\right) r dr d\phi dz \quad (4.19)$$

berechnet, wobei Q_{Puls} die Energie des Pulses, σ_R der rms-Radius des Pulses und l_{Abs} die Eindringtiefe bzw. Absorptionslänge sind. Des Weiteren erlaubt das Programm das Absorptionsprofil eines vorher berechneten Undulatorstrahlungsspektrums (siehe Abb. 2.4) zu berechnen. Mit einer Lochblende lässt sich die Strahlung auf eine bestimmte Größe r_{Blende} beschränken. Aus der absorbierten Energiedichte wird das Temperaturfeld T_{pulse} über die spezifische Wärmekapazität

$$T_{\text{Element}} = \frac{Q_{\text{Element}}}{c_{P,m} m_{\text{Element}}} \quad (4.20)$$

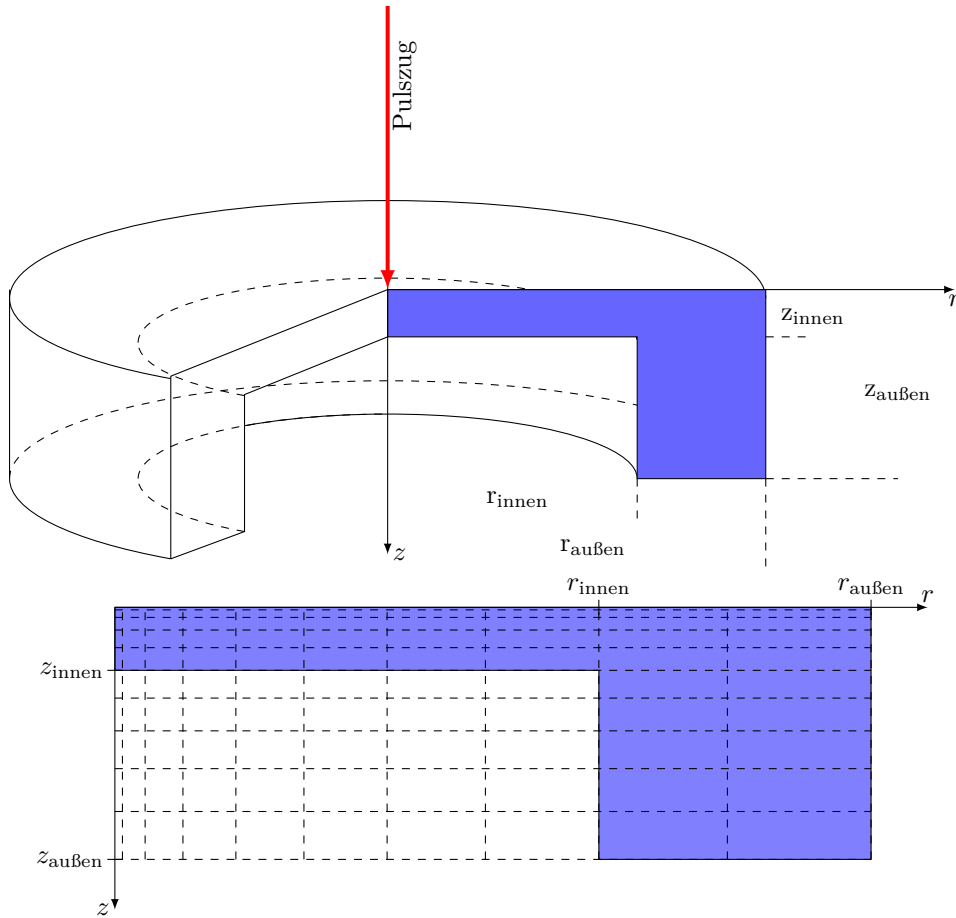


Abbildung 4.4.: Schematische Darstellung des Kristalls der thermischen Simulation. Oben: Perspektivische Darstellung des Kristalls. Von oben werden die als rotationssymmetrisch angenommenen Pulse auf die Kristallstirnfläche geleitet und absorbiert. Der Kristall ist im Zentrum durch z_{innen} und r_{innen} definiert. Im äußeren Bereich ($r_{\text{innen}} < r < r_{\text{außen}}$) ist die Kristalldicke $z_{\text{außen}}$. Die Simulation berechnet die Temperatur in der blau markierten Fläche. Unten: Die oben blau markierte Fläche ist mit Gittern, deren Gitterabstand sich quadratisch in beiden Dimensionen ändert, dargestellt.

berechnet, wobei $c_{p,m}$ die mittlere spezifische Wärmekapazität und m_{Element} die Masse des betrachteten Gitterelements sind.

4.3.3. Temperaturdifferenzen pro Zeiteinheit

Der Wärmetransport wird mit Gl. 4.9 berechnet. Um die Temperaturdifferenz zwischen den einzelnen Gitterelementen zu berechnen, wird mit der Funktion **SHIFT** das Gitter einmal nach rechts und einmal aufwärts verschoben. Aus der Differenz der beiden Temperaturfelder lässt sich die Temperaturdifferenz zwischen den Gitterelementen berechnen. Diese Temperaturdifferenzen werden mit der Wärmeleitfähigkeit der jeweiligen Temperatur des Gitterelementes, der entsprechenden Flächen und Abständen der Gitterelemente multipliziert, sodass der Wärmefluss für jedes Gitterelement berechnet wird (vgl Gl. 4.9). Der Wärmefluss kann in radialer

Richtung mit einem Faktor

$$\Delta_{\text{bal}} = \frac{1}{1 + \frac{4}{3} \frac{l_{\text{mfp}}}{d_{\text{Krist}}}}, \quad (4.21)$$

der die ballistische Korrektur beschreibt, modifiziert werden. Die Temperaturdifferenzen pro Zeiteinheit in z-Richtung werden nicht korrigiert, da in dieser Richtung der betrachtete Körper groß gegenüber der mittleren freien Weglänge ist. Entscheidend für die Korrektur ist die Dicke des Kristalls senkrecht zum Wärmefluss, der betrachtet wird.

4.3.4. Randbedingungen

Anschließend werden die Randbedingungen für das Gitter angewandt. An den Rändern des Kristalls fließt keine Energie in den Kristall oder heraus

$$\begin{aligned} \dot{Q}(r = 0, z) &= 0 \\ \dot{Q}(r, z = 0) &= 0 \\ \dot{Q}(r = r_{\text{außen}}, z) &= 0 \\ \dot{Q}(0 < r < r_{\text{innen}}, z_{\text{innen}} < z \leq z_{\text{außen}}) &= 0 \\ \dot{Q}(r \geq r_{\text{innen}}, z = z_{\text{außen}}) &= 0. \end{aligned}$$

4.3.5. Iterationsschleife

Durch entsprechende Summation und unter Berücksichtigung der spezifischen Wärmekapazität lässt sich die zeitliche Temperaturänderung bestimmen, die noch mit einem zeitlichen Iterationsschritt multipliziert werden muss, um die Temperaturänderung dT_{dt_x} bzw. dT_{dt_z} zu erhalten, welche zu dem Temperaturfeld T_{pulse} addiert wird. Bei dem hier genutzten EULER-Verfahren zur Berechnung der Temperatur am nächsten Zeitschritt müssen diese vor allem für tiefe Temperaturen (~ 50 K) klein sein, damit die Berechnung stabil ist (QUARTERONI *et al.*, 2005). Das führt zu unphysikalisch hohen Diffusionsgeschwindigkeiten, die oberhalb der Schallgeschwindigkeit des jeweiligen Mediums liegen. Um diese zu kompensieren, sind die Faktoren $v_{\text{corr_x}}$ bzw. $v_{\text{corr_z}}$ eingeführt worden, die, wenn sie größer als eins sind, auf eins gesetzt werden.

Die Berechnung des Energieflusses multipliziert mit dem Zeitschritt wird so häufig wiederholt bis die Summe der zeitlichen Iterationsschritte dem zeitlichen Abstand der Pulse im Pulszug entspricht. Dann wird für jedes Gitterelement die Wärmemenge bestimmt und mit dem Absorptionsprofil eines neuen Pulses addiert, um daraus ein neues Temperaturfeld zu berechnen, welches die Iterationsschleife erneut durchläuft.

Bisher wurde angenommen, dass die zeitliche Ausdehnung des Pulses klein gegenüber einem zeitlichen Iterationsschritt ist, sodass die Pulsenergie auf einmal absorbiert wird. Für längere Pulse kann nach jedem Iterationsschritt ein Bruchteil der absorbierten Energie addiert werden, solange die Summe der zeitlichen Iterationsschritte kleiner als die Länge des Pulses ist.

Die Berechnung des Erwärmungsprozesses der BRAGG-Kristalle ist integraler Bestandteil für den Aufbau und Konzeption eines XFELs. Wie in dem Kapitel zur Berechnung der Strahlung

eines XFELs gezeigt wird, ist die Sättigungsenergie unterschiedlich und macht es für einige Arbeitspunkte unmöglich, einen XFEL zu betreiben, da die absorbierte Energie der Kristalle zu einer Erwärmung führt, die den Kristall zerstören würde. Durch die Implementation der Berechnung der Temperatur der Kristalle in die Berechnung des Verstärkungsprozesses ist es möglich, die thermischen Einflüsse auf die Verstärkung näher zu untersuchen. Dazu ist ein schnelles, auf die Simulation angepasstes Programm notwendig. Hierfür wird statt des zweidimensionalen Programms eine eindimensionale radial-symmetrische Berechnung genutzt, da der Zeitaufwand der zweidimensionalen Berechnung um ein vielfaches höher ist.

5. XFEL-Konfigurationen

In diesem Kapitel werden die möglichen Resonatoren, die am European XFEL aufgebaut werden können, diskutiert. Dazu gehören neben der Spiegelanordnung auch die unterschiedliche Längen des Resonators, sowie die Positions- und Richtungsfehler des Strahls, hervorgerufen durch eine Winkelfehlstellung der Kristalle. Des Weiteren wird hier eine magnetische Schikane zur Einkopplung der Elektronenpakete in den Resonator diskutiert.

5.1. Beschreibung der Resonatoren mit ABCD-Formalismus

Wichtige Eigenschaften des Resonators, wie das Stabilitätskriterium, die Strahlgröße des Lichts, die Propagation oder die Positions- und Richtungsabweichungen der Kristalle im Winkel können mit dem Matrix-Formalismus beschrieben werden, gemäß

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x'_1 \end{pmatrix} = M_T \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad M_T = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

wobei $x_{0,1}, x'_{0,1}$ Ort und Winkel des Eingangs- bzw. Ausgangsstrahls und die Matrix M_T die Transfermatrix des optischen System sind. Für eine Driftstrecke der Länge s bzw. eine dünne Linse der Brennweite f ist die Matrix gegeben durch

$$M_s = \begin{pmatrix} 1 & s \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad M_f = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{1}{f} & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

Die Transfermatrix eines Resonators kann als Abfolge der verschiedenen Matrizen geschrieben werden, wobei Anfangs- und Endzustand gleich sind. Im einfachsten Fall mit einer Driftstrecke, einer Linse und einer Driftstrecke ist diese gegeben durch:

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} = M_T \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad M_T = M_s M_f M_s. \quad (5.3)$$

Die Matrix M_T kann dann als

$$M_T = \begin{pmatrix} C & S \\ C' & S' \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

angesehen werden. Das Stabilitätskriterium SK eines Oszillators für einen dauerhaft stabilen Strahl ist gegeben durch die Bedingung an die Spur der Transformationsmatrix

$$-1 \leq \frac{C + S'}{2} \leq 1. \quad (5.5)$$

Eine Fehlstellung des ersten Kristalls mit einem Winkel $\Delta\theta$, bewirkt eine Abweichung der Strahlage um Δx und des Winkels um $\Delta x'$ zur optischen Achse (KIM, 2009). Diese Abhängigkeit kann bestimmt werden, indem an der entsprechenden Position im Resonator ein Winkel von $2\Delta\theta$ addiert wird, was einer Fehlstellung im Winkel eines Spiegels von $\Delta\theta$ entspricht

$$\begin{pmatrix} x_0 + \Delta x \\ x'_0 + \Delta x' \end{pmatrix} = M_{T''} \cdot \left(M_{T'} \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 2\Delta\theta \end{pmatrix} \right), \quad (5.6)$$

wobei $M_{T''}$ und $M_{T'}$ die Teiltransfermatrizen zwischen dem Anfang und dem Element mit Fehlstellung bzw. Element mit Fehlstellung und Ende sind.

5.1.1. Zwei gekrümmte Bragg-Kristalle

Für einen Resonator aus zwei Hohlspiegeln (2HS-Konfiguration, Abb. 5.1) ist die Transfermatrix eines Resonatorumlaufs und die Winkelabhängigkeit $\Delta\theta'$ für die Änderung der Strahlage Δx und des Strahlwinkels $\Delta x'$ gegeben durch:

$$M_{2HS} = \begin{pmatrix} 2X^2 - 1 & -2fX(X^2 - 1) \\ -\frac{2X}{f} & 2X^2 - 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ \frac{1}{2-X} \end{pmatrix} \Delta\theta, \quad (5.7)$$

wobei $X = 1 - s/f$, f die fokale Länge des Hohlspiegels und s der Abstand zwischen der Undulatorenmittle und dem Hohlspiegel sind. In Tab. 5.1 sind Werte für die Abstände der optischen Elemente und Fehlwinkel in der Aufstellung des ersten BRAGG-Kristalls zusammengefasst, die für diese Resonatorkonfiguration gelten. Die zwei berechneten Winkelfehlstellungen ($\Delta\theta_x, \Delta\theta_{x'}$) aus Gl. 5.7 ergeben sich aus der Annahme einer Ablage Δx , die 10 % der Strahlgrösse ω_0 und einem Winkel zur optischen Achse $\Delta x'$, der 10 % der Divergenz des Strahls entspricht. Diese Resonatorkonfiguration hat die kleinste Toleranz für Aufstellungsfehler im Winkel der Spiegel für die betrachteten Resonatorkonfigurationen.

Das FEL-Simulationsprogramm GINGER legt diese Resonatorkonfiguration zugrunde. Solange keine Fehler der Optiken betrachtet werden, ist die Resonatorkonfiguration nicht entscheidend für die Berechnung des FEL-Prozesses, sodass die genaue Beschreibung der Resonatorkonfiguration nicht notwendig ist. Es ist vielmehr die Fokussierung der Strahlung in den Undulator. Zwei Linsen und zwei Driftstrecken bieten in diesem Fall genügend Freiheitsgrade, um das Strahlungsprofil an den Elektronenstrahl anzupassen.

5.1.2. Zwei Bragg-Kristalle und ein fokussierender Spiegel

Die Abb. 5.2 stellt einen Resonator mit zwei BRAGG-Kristallen und einem fokussierenden Spiegel im streifenden Einfall dar. Die Divergenz der Strahlung an der Position der BRAGG-Kristalle ist durch die RAYLEIGH-Länge der Strahlung definiert. Die Reflektivität der BRAGG-Kristalle ist aufgrund der höheren Divergenz der Strahlung etwas geringer.

Die Transfermatrix aus Gl. 5.3 beschreibt die Propagation des Lichts eines Resonators, bestehend aus zwei BRAGG-Kristallen und einem fokussierenden Spiegel (2K,1M-Konfiguration). Die Transfermatrix und die Winkelabhängigkeit bezüglich einer Änderung der Strahlage Δx

Tabelle 5.1.: Parameter für einen Resonator mit zwei gekrümmten Kristallen („2HS“, (siehe Abb. 5.1).

Resonatorlänge	L_R	m	33.310	49.965	66.621
Abstand Strahltille-Spiegel	$\overline{\omega_0 s_{Sp1}}$	m	16.655	24.983	33.310
Abstand Spiegel-Strahltille	$\overline{s_{Sp1} \omega_1}$	m	16.655	24.983	33.310
Abstand Spiegel-Kristall	$\overline{s_{Sp1} s_{Krst}}$	m	0	0	0
Strahltille bei ω_0	$\omega_0(s=0)$	μm	14.639	14.639	14.639
Strahlgröße am Kristall	$\omega(s=s_{Krst1})$	μm	40.063	57.823	76.008
Strahlgröße bei ω_1	$\omega(s=L_R/2)$	μm	14.639	14.639	14.639
RAYLEIGHlänge bei ω_0	$z_R(s=0)$	m	6.5376	6.5376	6.5376
RAYLEIGHlänge bei ω_1	$z_R(s=L_R/2)$	m	6.5376	6.5376	6.5376
Öffnungswinkel bei ω_0	$\theta_{\triangleleft}(s=0)$	μrad	2.2391	2.2391	2.2391
Öffnungswinkel bei ω_1	$\theta_{\triangleleft}(s=L_R/2)$	μrad	2.2391	2.2391	2.2391
Brennweite der Linse	f	m	9.6107	13.347	17.297
Stabilitätskriterium	SK		0.0745	0.5201	0.7143
Winkelfehlstellung	$\Delta\theta_x$	nrad	152.31	109.68	84.632
Winkelfehlstellung	$\Delta\theta_{x'}$	nrad	29.894	14.351	8.3051

und des Strahlwinkels $\Delta x'$ ist gegeben durch

$$M_{2K,1M} = \begin{pmatrix} X & f(1-X^2) \\ -\frac{1}{f} & X \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2f - s'_1 \\ s'_1 \end{pmatrix} \Delta\theta, \quad (5.8)$$

wobei wieder $X = 1 - s/f$ ist. In Tab. 5.2 sind die Abstände und die Winkelfehlstellungen für die gleichen Annahmen wie für die Resonatorkonfiguration „2HS“ für drei unterschiedliche Resonatorlängen zusammengefasst.

5.1.3. Zwei Bragg-Kristalle und zwei fokussierende Spiegel

Für einen Resonator, bestehend aus zwei fokussierenden Elementen und zwei Kristallen (2K,2M-Konfiguration, siehe Abb. 5.3) kann die Symmetrie des Resonators ausgenutzt werden, sodass zunächst die Transfermatrix eines halben Resonators $\overline{\omega_0 \omega_1}$ berechnet und vereinfacht wird (vgl. Gl. 5.8). Die beiden Symmetriepunkte sind in der Mitte des Undulators ($s = 0$) und bei $s = (s_1 + s_2 + s_2 + s_1)/2$, wobei s_1 und s_2 die Teilstrecken $s_1 = \overline{\omega_0 L_1}$ und $s_2 = \overline{L_1 \omega_1}$ sind. Die Transfermatrix des gesamten Resonators und die Winkelabhängigkeit der Strahlage und des

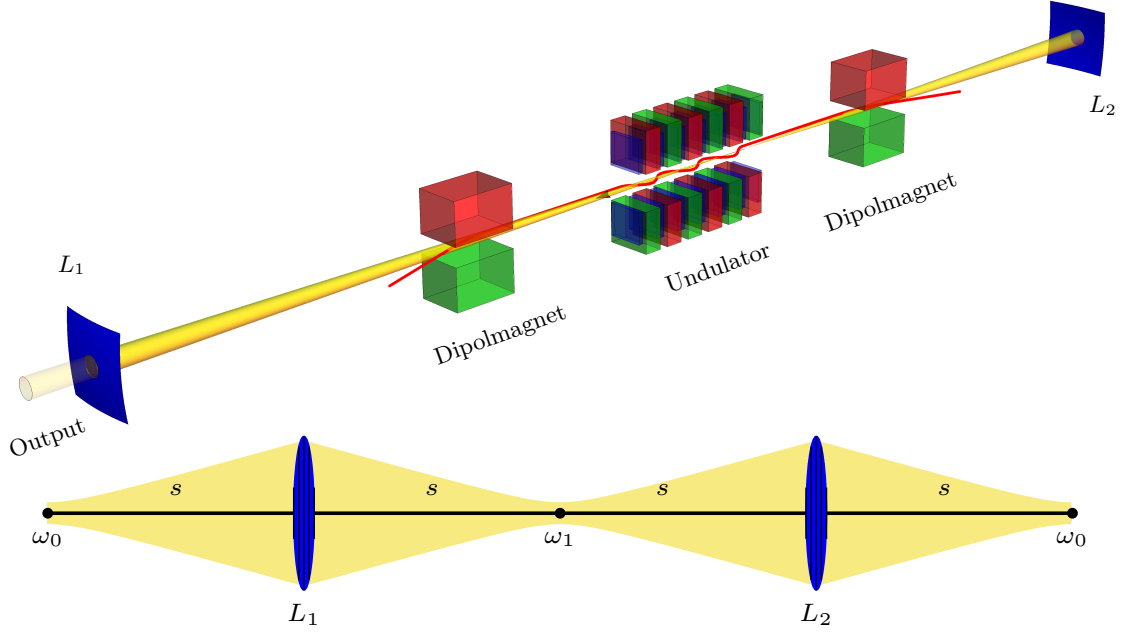


Abbildung 5.1.: Oben: Schematische Darstellung einer Resonatorkonfiguration „2HS“ mit zwei gekrümmten BRAGG-Kristallen $L_{1,2}$. Das Elektronenpakets (rot) wird über die zwei Ablenkermagnete durch den Undulator geführt. Die Strahlung (gelb) wird über die gekrümmten BRAGG-Kristalle zurück in den Undulator geleitet. Ein Teil der Strahlung wird am ersten BRAGG-Kristall ausgekoppelt. Unten: Schematische Darstellung des entfalteten Resonators mit den Symmetriepunkten ω_0 und $\omega(L_R/2)$ in der Mitte des Undulators. Der Verlauf der Strahlgröße ist in gelb dargestellt.

Strahlwinkels sind gegeben durch:

$$M_{2K,2M} = \begin{pmatrix} 2X_1X_2 - 1 & -2fX_1(X_1X_2 - 1) \\ -\frac{2X_2}{f} & 2X_1X_2 - 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta x' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ \frac{\bar{s}_2}{f(1-X_1X_2)} \end{pmatrix} \Delta\theta, \quad (5.9)$$

wobei $X_i = 1 - s_i/f$, $i = 1, 2$ und $\bar{s}_2$ der Abstand zwischen erstem BRAGG-Kristall und der Strahltaile ω_1 sind. Spezifische Lösungen für unterschiedliche Resonatorlängen und RAYLEIGH-Längen sind in der nachfolgenden Tabelle 5.3 gegeben, wobei hier der Abstand zwischen Undulatormitte und Spiegel $\overline{\omega_0 s_{Sp1}}$ für die jeweilige Resonatorlänge ($L_R = 33.31, 49.97, 66.62$ m) konstant gehalten wird. Das führt zu unterschiedlichen Winkeltoleranzen bezüglich der Strahl-lage $\Delta\theta_x$ und des Strahlwinkels $\Delta\theta_{x'}$. Umgekehrt ist es auch möglich die Winkeltoleranz anzugleichen, was in den meisten Fällen zu einer unerwünschten Position des Spiegels führt aber größere Aufstellungsfehler des Spiegels zulässt. Steht der Spiegel zu weit weg vom BRAGG-Kristall, entsteht ein Konflikt zwischen Spiegel und magnetischer Schikane zur Einkopplung der Elektronen.

Vorteil dieser Anordnung ist, dass der Strahl kollimiert werden kann, bevor er auf den BRAGG-

Tabelle 5.2.: Parameter für Resonator mit zwei Kristallen und einem fokussierenden Spiegel.

Resoantorlänge	L_R	m	33.310	49.965	66.621
Abstand Strahltaille-Spiegel	$\overline{\omega_0 s_{\text{Sp1}}}$	m	33.310	49.965	66.621
Abstand Spiegel-Strahltaille	$\overline{s_{\text{Sp1}} \omega_1}$	m	0	0	0
Abstand Spiegel-Kristall	$\overline{s_{\text{Sp1}} s_{\text{Krst}}}$	m	16.655	24.983	33.310
Strahltaille bei ω_0	$\omega_0(s=0)$	μm	14.639	14.639	14.639
Strahlgröße am Kristall	$\omega(s=s_{\text{Krst1}})$	μm	38.004	56.416	74.944
Strahlgröße bei ω_1	$\omega(s=L_R/2)$	μm	76.008	112.83	149.89
RAYLEIGHlänge bei ω_0	$z_R(s=0)$	m	6.5376	6.5376	6.5376
RAYLEIGHlänge bei ω_1	$z_R(s=L_R/2)$	m	6.5376	6.5376	6.5376
Öffnungswinkel bei ω_0	$\theta_{\triangleleft}(s=0)$	μrad	2.2391	2.2391	2.2391
Öffnungswinkel bei ω_1	$\theta_{\triangleleft}(s=L_R/2)$	μrad	11.626	17.259	22.927
Brennweite der Linse	f_i	m	33.631	50.179	66.781
Stabilitätskriterium	SK		-0.990	-0.996	-0.998
Winkelfehlstellung	$\Delta\theta_x$	nrad	43.527	29.172	21.920
Winkelfehlstellung	$\Delta\theta_{x'}$	nrad	223.91	223.91	223.91

Kristall geleitet wird und somit die Divergenz des Strahls auf dem Kristall sehr klein ist, sodass die Winkelakzeptanz der BRAGG-Kristalle nur eine untergeordnete Rolle spielt. Die Durchstimmbarkeit der Wellenlänge ist durch den kleinen Winkel der Totalreflexion $\theta_{\text{tot}} = \sqrt{|\chi_0|}$ des fokussierenden Spiegels im streifenden Einfall gegeben, und liegt, wie beim Resonator „2K,1M“, im Bereich von $\Delta\lambda/\lambda \approx 10^{-6}$.

Es ist denkbar, einen Resonator aus den gleichen optischen Elementen aufzubauen aber die Reihenfolge zu ändern, sodass der Strahl zunächst auf den BRAGG-Kristall trifft und anschließend auf die fokussierenden Spiegel. Diese Anordnung ist von Vorteil, wenn die Dispersion, hervorgerufen zum Beispiel durch stark asymmetrische BRAGG-Reflexion, kompensiert werden soll und damit die Photonenpulslänge konstant gehalten wird (vgl. PARK *et al.*, 2012).

5.1.4. Vier Bragg-Kristalle und zwei fokussierende Spiegel

Alle bisher vorgestellten Resonatorkonfigurationen konnten entweder nicht oder in einem sehr engen Wellenlängenbereich durchgestimmt werden ($< 10^{-6}$). Mit einem Resonator aus vier BRAGG-Kristallen in den Ecken eines Trapezes und zwei fokussierenden Elementen (4K,2M-Konfiguration) kann die Wellenlänge über einen weitaus größeren Wellenlängenbereich verstellt werden (KIM *et al.*, 2009). In Abb. 5.4 ist ein solcher Resonator schematisch dargestellt. Die Änderung der Wellenlänge erfolgt durch Änderung des horizontalen Abstands H zwischen der Achse der Kristalle (C_2, C_3) und der Undulatorachse. Diese Änderung des Abstandes ändert den der BRAGG-Winkel θ_B und legt den Bereich fest, über den die Wellenlänge durchgestimmt

Tabelle 5.3.: Parameter für Resonator mit zwei fokussierenden Elementen („2K,2M“-Konfiguration) mit einer Betafunktion in der Undulatormitte von $\beta_0 = 6.0$ m für beide transversale Richtungen.

Resonatorlänge	L_R	m	33.310	49.965	66.621
Abstand Strahltaille-Spiegel	$\overline{\omega_0 s_{Sp1}}$	m	15.655	23.983	32.310
Abstand Spiegel-Strahltaille	$\overline{s_{Sp1} \omega_1}$	m	17.655	25.983	34.310
Abstand Spiegel-Kristall	$\overline{s_{Sp1} s_{Krst}}$	m	1.0000	1.0000	1.0000
Strahltaille bei ω_0	$\omega_0(s=0)$	μm	14.541	14.541	14.541
Strahlgröße am Kristall	$\omega(s=s_{Krst1})$	μm	37.752	55.811	74.175
Strahlgröße bei ω_1	$\omega(s=L_R/2)$	μm	34.214	53.686	72.636
RAYLEIGHlänge bei ω_0	$z_R(s=0)$	m	6.4511	6.4511	6.4511
RAYLEIGHlänge bei ω_1	$z_R(s=L_R/2)$	m	35.714	87.933	160.96
Öffnungswinkel bei ω_0	$\theta_{\triangleleft}(s=0)$	μrad	2.2541	2.2541	2.2541
Öffnungswinkel bei ω_1	$\theta_{\triangleleft}(s=L_R/2)$	μrad	0.9580	0.6105	0.4513
Brennweite der Linse	f_L	m	15.214	23.824	32.227
Stabilitätskriterium	SK		-0.987	-0.998	-0.999
Winkelfehlstellung	$\Delta\theta_x$	nrad	95.577	61.035	45.122
Winkelfehlstellung	$\Delta\theta_{x'}$	nrad	102.47	107.41	109.02

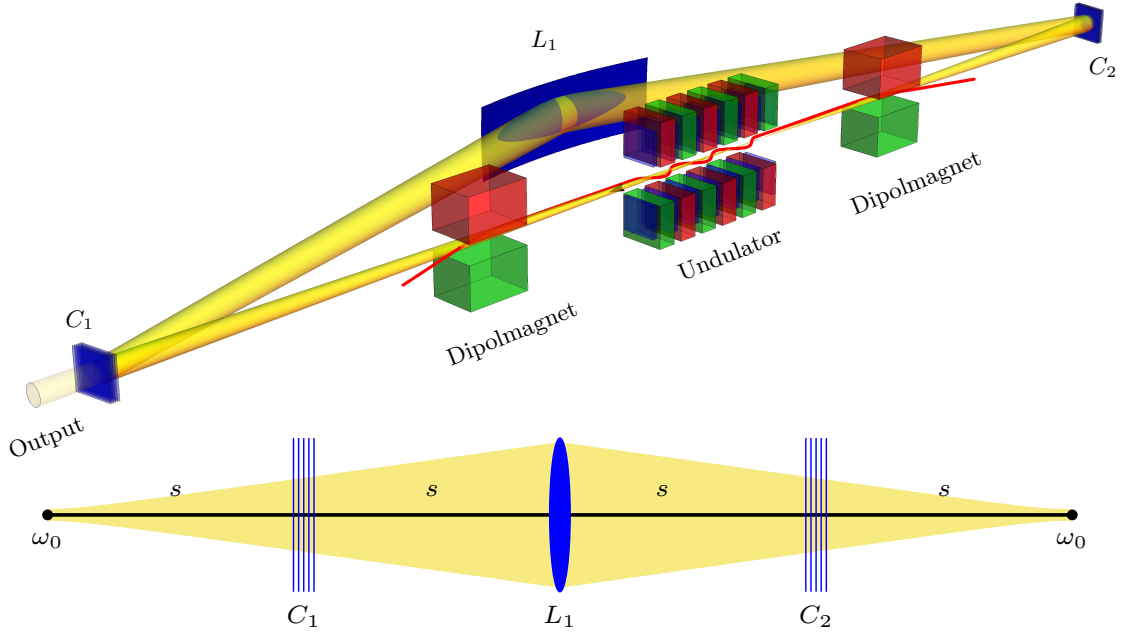


Abbildung 5.2.: Oben: Schematische Darstellung einer Resonatorkonfiguration mit einem fokussierenden Element L_1 und zwei BRAGG-Kristallen $C_{1,2}$. Das Elektronenpaket (rot) wird über die zwei Ablenkmagnete durch den Undulator geführt. Die Strahlung (gelb) wird über die BRAGG-Kristalle und den fokussierenden Spiegel zurück in den Undulator geleitet. Ein Teil der Strahlung wird am ersten BRAGG-Kristall ausgekoppelt. Unten: Schematische Darstellung des entfalteten Resonators mit dem Symmetriepunkt ω_0 in der Mitte des Undulators, den BRAGG-Kristallen $C_{1,2}$ und der fokussierenden Spiegel im streifenden Einfall L_1 . Der Verlauf der Strahlgröße ist in gelb dargestellt.

werden kann:

$$\Delta\lambda_{\text{Tunn}} = 2d_H (\sin(\theta_B) - \sin(\theta_B + \Delta\theta_{\text{Tunn}})). \quad (5.10)$$

Da der Abstand zwischen den Kristallen $\overline{C_1 C_4}$ konstant bleibt, muss sich der Abstand zwischen den Kristallen $\overline{C_2 C_3}$ ändern, damit die Länge des Resonators konstant bleibt. Der maximale Abstand H_{Max} , der im Tunnel des European XFELs erreicht werden kann, liegt bei $\sim 3.5 - 4.0$ m (Annahme: Abstand zur Tunnelwand $0.5 \text{ m} - 0.25 \text{ m}$). Dieser maximale Abstand führt zu einer Durchstimmbarkeit der Wellenlänge von etwa $\Delta\lambda/\lambda \approx 0.13 - 0.5\%$ (vgl. Tab. 5.4). Die Toleranzen, die in Tab. 5.3 gegeben sind, sind auch für diese Resonatorkonfiguration gültig, bis auf den Abstand zwischen Spiegel und Kristall $\overline{s_{\text{Sp1}} s_{\text{Krist}}}$, der kleiner wird.

5.2. Auskopplung der Photonen

Für die Auskopplung der gespeicherten Photonen können dünne BRAGG-Kristalle eingesetzt werden. Die Dicke der Kristalle ist dabei so gewählt, dass ein Teil der Photonen den Kristall durchdringt. Je höher die Photonenenergie der gespeicherten Strahlung ist, desto tiefer dringen

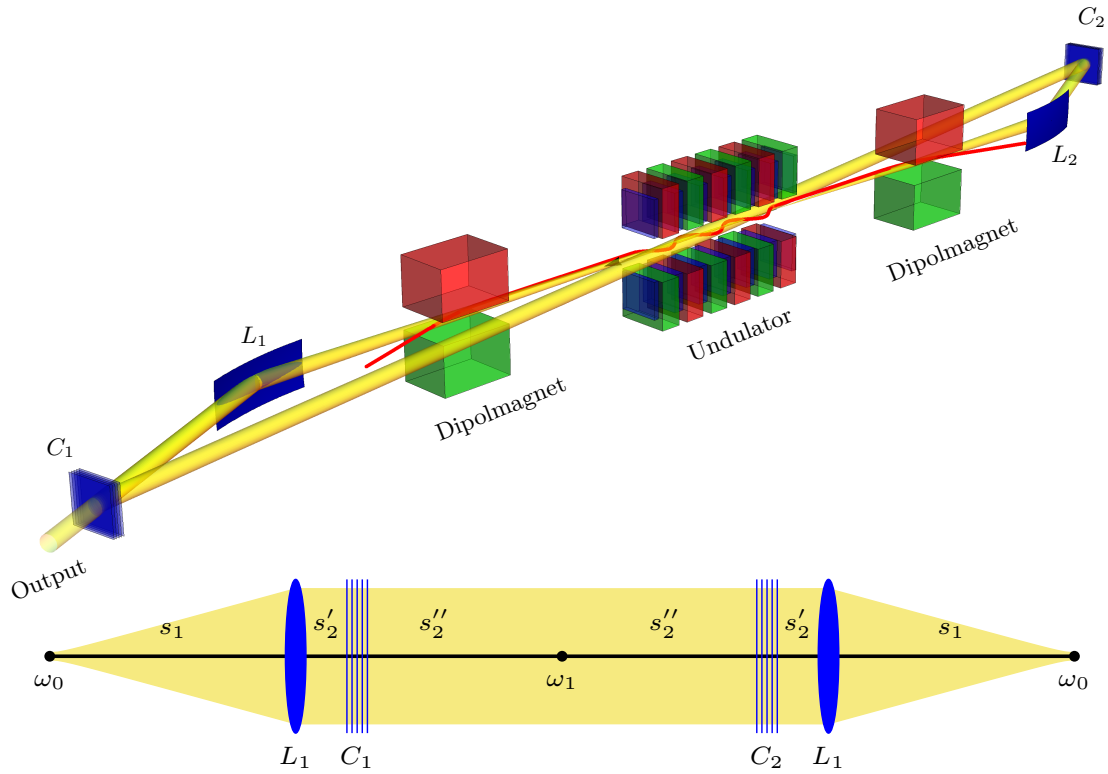


Abbildung 5.3.: Oben: Schematische Darstellung einer Resonatorkonfiguration mit zwei fokussierenden Elementen $L_{1,2}$ und zwei BRAGG-Kristallen $C_{1,2}$. Das Elektronenpakets (rot) wird über die zwei Ablenkmagnete durch den Undulator geführt. Die Strahlung (gelb) wird über die BRAGG-Kristalle und den fokussieren Spiegel zurück in den Undulator geleitet. Ein Teil der Strahlung wird am ersten BRAGG-Kristall ausgekoppelt. Unten: Schematische Darstellung des entfalteten Resonators mit den Symmetriepunkten ω_0 in der Mitte des Undulators und ω_1 in der Mitte des Resonators, den BRAGG-Kristallen $C_{1,2}$ und den fokussierenden Spiegeln im streifenden Einfall $L_{1,2}$. Der Verlauf der Strahlgröße ist in gelb dargestellt.

die Photonen in den Kristall. Für Kristalle mit gleichen Transmissionswerten nimmt die Dicke des Kristalls mit steigenden Photonenenergie zu (siehe Abschnitt 3).

Eine weitere Möglichkeit ist eine Beugung mit einer einlaufenden und zwei auslaufenden Wellen zu nutzen (Drei-Strahlfall). Das Verhältnis der beiden gebeugten Strahlen lässt sich über den Einfallswinkel bezüglich der Netzebenen einstellen.

Die beiden Konzepte haben ihre Vor- und Nachteile. Der Vorteil der dünnen Kristalle liegt in der Durchstimmbareit der gespeicherten Strahlung im Rahmen dessen, was oben vorgestellt worden ist. Der Nachteil liegt in der geringeren Wärmeleitung dünner Kristalle. Die Kristalle zur Auskopplung (z.B. $d_{\text{Krist}} \approx < 42 \mu\text{m}$ für 12 keV Photonen) aus Diamant sind dünner als die mittlere freie Weglänge, sodass ballistische Effekte in der Wärmeleitung einen negativen Einfluss auf die Wärmeleitung haben. Eine Auskopplung eines Teils der Strahlung über einen Drei-Strahlfall lässt sich nicht durchstimmen und ein geeigneter Reflex und die Machbarkeit der Auskopplung von Strahlung aus einem Oszillator muss erst noch erbracht werden. Dafür kann

Tabelle 5.4.: Parameter für Resonator „2C,4M“ (siehe Abb. 5.4). Es wird eine Wellenlänge von etwa $\lambda_{\text{Rad}} \approx 1 \text{ \AA}$ angenommen, die einem Diamantkristall der Orientierung (444) entspricht.

Resonatorlänge	L_R	m	33.310	49.965	66.621
Abstand Strahltille ω_0 Kristall	$\overline{\omega_0 s_{\text{Krist1}}}$	m	15.97	24.36	32.72
Abstand Kristall Strahltille ω_1	$\overline{s_{\text{Krist1}} \omega_1}$	m	17.34	25.61	33.90
Abstand zwischen Undulatorachse und Achse $\overline{C'_2, C'_3}$	H_{Min}	m	0.500	0.500	0.500
Abstand zwischen Undulatorachse und Achse $\overline{C_2, C_3}$	H_{Max}	m	3.500	3.500	3.500
Minimaler BRAGG-Winkel	$\theta_{B,\text{Min}}$	rad	1.466	1.501	1.518
Maximaler BRAGG-Winkel	$\theta_{B,\text{Max}}$	rad	1.556	1.561	1.563
Minimale Wellenlänge	λ_{Min}	\AA	1.024	1.027	1.028
Maximale Wellenlänge	λ_{Max}	\AA	1.030	1.030	1.030
Relative Wellenlängenänderung	$\Delta\lambda/\lambda$	%	0.536	0.239	0.135

die Kristalldicke frei gewählt werden, sodass ballistische Effekte in der Wärmeleitung reduziert werden können. Des Weiteren ist es möglich, das Verhältnis zwischen der gespeicherten und der ausgekoppelten Intensität einzustellen.

5.3. Einkopplung des Elektronenstrahls in den Resonator

Eine magnetische Schikane und die Fokussierung der Elektronen in den Undulator ist nötig, um den Elektronenstrahl entsprechend den Vorgaben aus den numerischen Simulationen bezüglich der FEL-Prozesses in den Undulator einzukoppeln. Das Elektronenpaket muss um den vor dem Undulator positionierten BRAGG-Kristall und fokussierenden Spiegel herum auf die Undulatorachse gebracht werden. Eine Quadrupol-Dubletten-Anordnung ist nötig, um einen runden Elektronenstrahl im Undulator zu erhalten (siehe Abb. 5.5). Die Einkopplung besteht aus vier Dipolmagneten und sechs Quadrupolmagneten. Es werden vier Dipole genutzt, um die Dispersion zu schließen. In der gezeigten Abbildung ist der Bereich nur bis zum Ende des Undulators dargestellt. Die Auskopplung der Elektronen kann entsprechend der Einkopplung erfolgen, wobei an die Fokussierung geringere Anforderungen gestellt werden können, da der Elektronenstrahl hinter dem XFELO nicht weiter verwendet wird.

Die Betafunktion in der Mitte des Undulators ist $\beta_{0,x,y} = 6 \text{ m}$. Strahldynamische Effekte durch die Schikane sind nicht zu beobachten. Die Quadrupollängen und Fokussierstärken der Quadrupole, die für die Einkopplung nötig sind, können mit denen, die bereits im European XFEL zum Einsatz kommen werden, erreicht werden.

Die Berechnungen zur Strahldynamik und Positionierung der Quadrupole und Quadrupolstärken wurden mit dem Programm ELEGANT (BORLAND, 2012) für die Strahlparameter eines 1 nC Elektronenpakets durchgeführt (MAAG *et al.*, 2012). Abbildung 5.6 (links) zeigt die longitudinale Phasenraumverteilung vor der Schikane und am Anfang des Undulators. Die longitudinale Phasenraumverteilung vor der Schikane wurde idealisiert nachgebildet und Effekte aus der kohärenten Abstrahlung von Synchrotronstrahlung (CSR) wurden nicht berücksichtigt. Das Matrixelement R_{56} , welches die Kompression in einer Strahlführung beschreibt, liegt bei $5 \cdot 10^{-5} \text{ m}$. Das zeigt auch die Simulation. Die longitudinale Phasenraumverteilung ändert sich

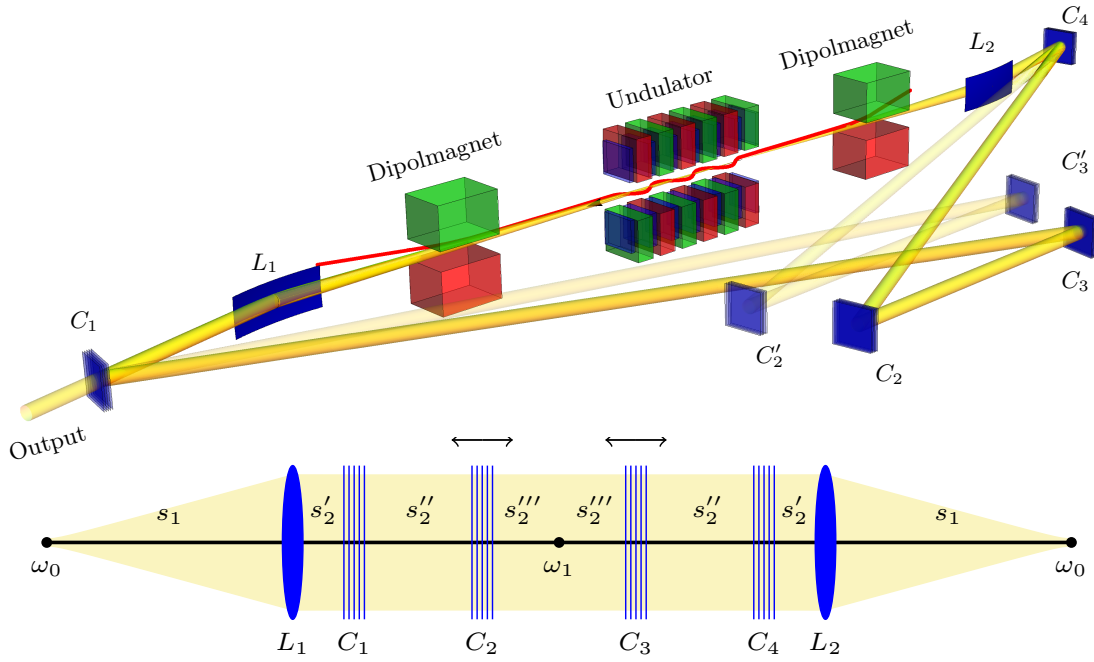


Abbildung 5.4.: Oben: Schematische Darstellung einer Resonatorkonfiguration mit zwei fokussierenden Elementen $L_{1,2}$ und vier BRAGG-Kristallen $C_{1,2,3,4}$ (4K,2M-Konfiguration). Für die Änderung der Wellenlänge werden die BRAGG-Kristalle $C_{2,3}$ auf eine andere Position gefahren ($C'_{2,3}$), sodass sich der BRAGG-Winkel für alle BRAGG-Kristalle gleich ändert. Der Pfad des Elektronenpakets (rot) wird über die zwei Ablenkmagnete durch den Undulator geführt. Die Strahlung (gelb) wird über die BRAGG-Kristalle (blau) und den fokussierenden Spiegel (blau) zurück in den Undulator geleitet. Ein Teil der Strahlung wird am ersten BRAGG-Kristall ausgekoppelt. Ein weiterer Strahlenverlauf für eine andere Wellenlänge ist in schwachem gelb zusätzlich eingezeichnet. Unten: Schematische Darstellung des entfalten Resonators mit den Symmetriepunkten ω_0 in der Mitte des Undulators und ω_1 in der Mitte des Resonators, den BRAGG-Kristallen $C_{1,2,3,4}$ und den fokussierenden Spiegeln im streifenden Einfall $L_{1,2}$. Der Verlauf der Strahlgröße ist in gelb dargestellt. Die Pfeile deuten an, dass die Position der Kristalle sich ändert wenn die Wellenlänge durchgestimmt wird.

nicht. Abbildung 5.6 (rechts) stellt die transversale Phasenraumverteilung vor dem Undulator für beide transversalen Richtungen dar. Mit den in Tab. 5.5 aufgelisteten Parametern ist es möglich, einen runden Strahl mit einer Strahltaille in der Mitte des Undulators zu erzeugen.

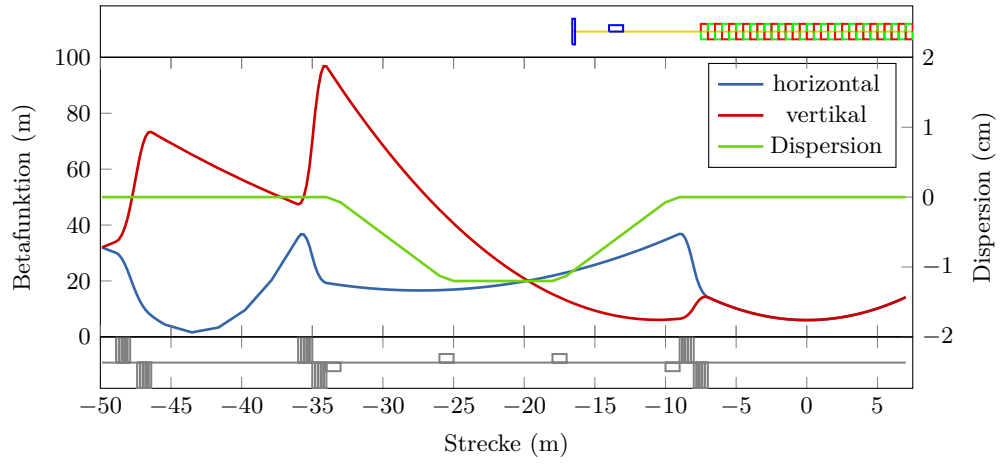


Abbildung 5.5.: Oben: Die Positionen des BRAGG-Kristalls, des fokussierenden Spiegels (beide blau) und des Undulators sind dargestellt. Mitte: Betafunktion und Dispersion im Bereich eines XFELs zur Einkopplung in den Resonator und zur Anpassung des Elektronenstrahls an den Photonenstrahl. Die Mitte des Undulators bzw. des Resonators liegt bei der Strecke = 0 m. Unten: Die Anordnung der magnetischen Komponenten zwei Quadrupol-Doubletten (vor dem ersten Dipol und hinter dem zweiten Dipol), um die Elektronen in den Undulator zu fokussieren, sind als große Rechtecke dargestellt (nach oben horizontal fokussierend, nach unten vertikal fokussierend). Die Dipole (kleine Rechtecke) dienen zur horizontalen Ablenkung des Elektronenpakets.

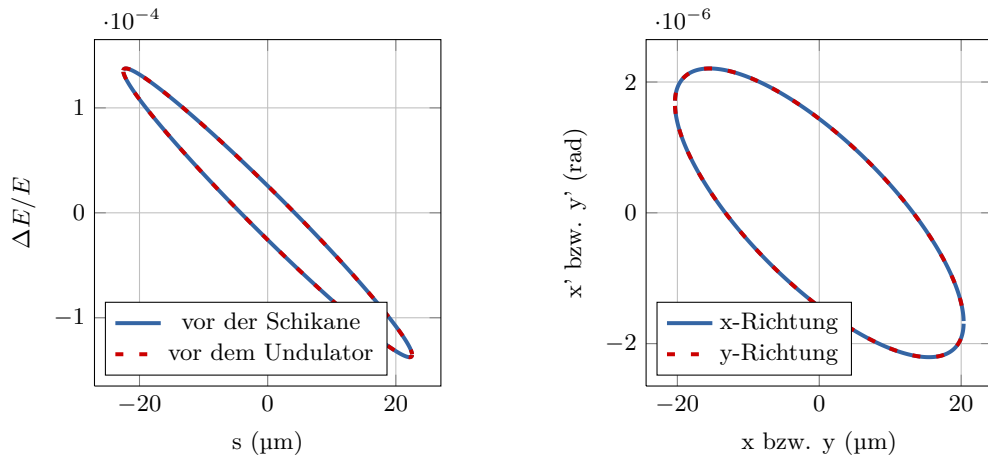


Abbildung 5.6.: Links: Longitudinale ein-Sigma Phasenraumellipse vor der Schikane (blau) bzw. dem Undulator (rot). Rechts: Transversale ein-Sigma Phasenraumellipse vor dem Undulator in horizontaler (blau) und vertikaler (rot) Richtung.

Elektronenenergie E_B	GeV	17.5
Ladung q	nC	1.00
Elektronenpaketlänge t_B	fs	75.0
horizontale Emittanz ε_x	mm mrad	1.00
vertikale Emittanz ε_y	mm mrad	1.00
Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung σ_{E_B}	MeV	0.45
korrelierte Energieabweichung ΔE_{Korr}	MeV	2.125
Ablenkwinkel	mrad	1.745
Matrixelement für Kompression R_{56}	m	$5 \cdot 10^{-5}$
Quadrupolstärke k_1	m^{-2}	0.025
Quadrupolstärke k_2	m^{-2}	-0.053
Quadrupolstärke k_3	m^{-2}	0.282
Quadrupolstärke k_4	m^{-2}	0.289
Quadrupolstärke k_5	m^{-2}	0.443
Quadrupolstärke k_6	m^{-2}	-0.450

Tabelle 5.5.: Numerische Parameter der ELEGANT-Simulation.

6. Numerische Simulation des FEL-Prozesses

Im Folgenden werden an Hand eines XFELs, aufgebaut mit Diamant als BRAGG-Kristall mit einer BRAGG-Wellenlänge von $1 \text{ \AA}$, die Eigenschaften der Strahlungspulse diskutiert, wie sie durch ein Elektronenpaket vom European XFEL erzeugt werden. Dabei werden unterschiedliche Ladungen 1 nC und 100 pC betrachtet. Ein weiterer Aspekt ist die Untersuchung eines XFELs, getrieben mit einem Elektronenpuls aus dem SASE-Undulator, der bereits einen SASE-Puls generiert hat. Diese Elektronenpakete haben hinsichtlich der Energieverteilung der Elektronen einen höheren Wert als strahldynamisch derzeit möglich ist (EMMA *et al.*, 2010; DING *et al.*, 2011; ALTARELLI *et al.*, 2007). Die erhöhte Energieabweichung der Elektronen von der mittleren Elektronenenergie begründet sich im Energieverlust der Elektronen durch Abstrahlung der FEL-Strahlung und beträgt bei Sättigung etwa $\sigma_{E_B} \approx E_B \cdot \rho_{\text{FEL}} \approx 10 \text{ MeV}$. Anschließend werden die Eigenschaften eines XFELs mit Diamantkristallen unterschiedlicher Orientierung diskutiert, sodass verschiedene Wellenlängen erzeugt werden. Abschließend werden die Einflüsse auf die Verstärkung untersucht, die aufgrund von Abweichungen von den Sollparametern oder Aufstellungsfehlern bzw. eines Oberflächenfehlers eines Spiegel im streifenden Einfall entstehen.

Zunächst wird eine Einführung in die Berechnung eines XFELs gegeben, wie sie im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt worden sind.

6.1. Numerische Simulation eines FEL-Oszillators

Wie in Abschnitt 2.6.2 bereits erwähnt, gibt es keine allgemeingültige analytische Lösung des Gleichungssystems, Gl. 2.25. Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei Programme zur mehrdimensionalen Berechnung der FEL-Verstärkung genutzt, GENESIS und GINGER (REICHE, 1999; FAWLEY, 2002). Der Entwickler von GINGER hat sein Programm in den letzten Jahren weiterentwickelt, um die Transferfunktion von BRAGG-Kristallen auf die Strahlung anzuwenden, um speziell XFELs zu simulieren (LINDBERG *et al.*, 2011). Die Lösung des Gleichungssystems erfolgt bei GINGER mit dem Ansatz der paraxialen Wellengleichung. Dabei wird der schnell oszillierende Term des elektrischen Feldes von der sich langsam ändernden Einhüllenden des elektrischen Feldes getrennt. Diese Näherung ist gültig solange die Bandbreite der Strahlung sehr viel kleiner ist als die betrachtete Frequenz des Lichts (FAWLEY, 2004).

Für GENESIS stehen keine wellenlängenabhängigen Programme zu Verfügung, die die FEL-Strahlung zum Undulatoranfang zurück propagiert. Es gibt zwei Programme, eines vom Entwickler des GENESIS-Programms, das einen XFEL simuliert, bei dem die numerisch berechnete Strahlung eine Frequenzauflösung haben muss, die der DARWIN-Breite des BRAGG-Kristalls entspricht (siehe Gl. 3.32). In diesem Fall muss nur eine FOURIER-Komponente der Strahlung wieder zurück zum Undulator propagiert werden, die für alle transversalen Ebenen des Gitters gleich ist. Ein weiteres Programm, **Optical Propagation Code (OPC)**, berechnet die Propagation des Lichtfeldes zurück zum Undulator wellenlängenunabhängig. Es ist nicht möglich einen spektralen Filter auf das Feld anzuwenden.

6.1.1. FEL-Simulations-Programme

Ginger: Die meisten hier im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten numerischen Simulationen eines XFELs sind mit dem Programm GINGER durchgeführt (siehe Abschnitt 6.2). Die Resonatorkonfiguration, mit der GINGER rechnet, besteht aus zwei Hohlspiegeln (siehe Abschnitt 5.1.1) und einem spektralen Filter, dessen Eigenschaften die Reflexionseigenschaften der BRAGG-Kristalle beinhalten. Diese Informationen werden als Textdatei eingelesen, in der Real- und Imaginärteil der Reflektivität in Abhängigkeit der Wellenlänge hinterlegt sind (siehe Abb. 3.4). Die Winkelabhängigkeit der BRAGG-Reflexion wird in diesen Simulationen nicht berücksichtigt. GINGER simuliert die Bewegung der Elektronen in drei Dimensionen, das Photonfeld hingegen wird als zylindersymmetrisch angenommen (FAWLEY, 2004). Für die numerischen Simulationen mit GINGER werden idealisierte Annahmen gemacht, wie eine GAUSS-förmige Ladungsverteilung, eine gleichförmige unkorrelierte Energieabweichung, keine korrelierte Lageänderung der Elektronenpakete. Es werden keine Feldfehler der Undulatoren berücksichtigt. Um eine hinreichend hohe Frequenzauflösung für das Lichtfeld im Hinblick auf die Frequenzbreite des BRAGG-Kristalls zu erreichen, muss die Länge des simulierten Zeitfensters wie folgt gewählt werden: $f_{\text{Auflösung}} = 1/t_{\text{Zeitfenster}}$. Um dies zu erreichen, werden der (zeitliche) Abstand zwischen den transversalen Ebenen und die Anzahl der transversalen Ebenen, die das Gitter bilden, so groß gewählt, dass eine entsprechende Frequenzauflösung erreicht wird, um die frequenzabhängigen Reflexionseigenschaften der BRAGG-Kristalle auflösen zu können. Für ein 75 fs langes Elektronpaket ist der Zeitabstand 1.5 fs, für ein 5 fs langes Elektronpaket 0.2 fs. Eine hohe zeitliche Auflösung (Abtast-Theorem (NYQUIST, 1928)), die die Moden im SASE-FEL auflöst (siehe Abb. 2.2), ist aufgrund der Auswirkung der BRAGG-Kristalle auf die zeitliche Pulsstruktur der Strahlung nach jedem Durchlauf durch den Undulator nicht notwendig (FAWLEY, 2009). Die Monochromatisierung reduziert die Anzahl der longitudinalen Moden. Das führt zu einer Pulsstruktur, welche zeitlich längere Strukturen aufweist als ein SASE-Puls und somit eine gröbere zeitliche Auflösung erlaubt. Das Programm, welches mir zur Verfügung stand, kann das Lichtfeld bis zu einer Photonenenergie von 12 keV berechnen. Die maximalen numerischen Parameter, die auch genutzt worden sind, betragen 2^7 transversale und 2^{11} longitudinaler Gitterpunkte. Der Abstand der transversalen Gitterpunkte ist nicht konstant, sodass, verglichen mit GENESIS, ein großes transversales Gitter aufgespannt werden kann ($r_{\text{Gitter}} = 1 \text{ mm}$). Aufgrund der limitierten Anzahl der transversalen Ebenen muss der Abstand der Ebenen bei GINGER bei $> 0.5 \text{ fs}$ liegen, um eine ausreichende Frequenzauflösung zu erhalten.

Genesis: Dieses Programm berechnet den FEL-Prozess vollständig in drei Dimensionen in einem mitbewegten rechtwinkligen Gitter mit konstantem Abstand. Einige in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse sind mit GENESIS berechnet worden. Um einen Oszillator zu berechnen, muss das Lichtfeld zurück zum Undulator propagiert werden. Das Programmpaket OPC berechnet die Propagation wellenlängenunabhängig. Dieses Programm kommt zum Einsatz, wenn mit GENESIS im zeitunabhängigen Modus Berechnungen durchgeführt werden. Bei diesen Berechnungen wird nur eine Wellenlängenkomponente berücksichtigt, da ein unendlich langes Elektronpaket angenommen wird, zum Beispiel bei der Untersuchung des Einflusses auf die Verstärkung für einen Aufstellungsfehler eines BRAGG-Kristalls (siehe Abschnitt 6.4.4) oder eine Wellenfrontstörung, hervorgerufen durch eine nicht ideale Oberfläche (siehe Abschnitt 6.4.7).

Für zeitabhängige Berechnungen mit GENESIS eignet sich dieses Programm nicht, da es keinen spektralen Filter auf das Feld anwenden kann. Dies ist aber zwingend notwendig zur Berechnung eines XFELs. Deshalb wurde für diesen Fall ein auf OPC basierendes Programm in C geschrieben, welches die Propagation und den spektralen Filter berechnen kann, das nachfolgend beschrieben wird. Vorweg noch ein paar numerische Parameter, die für die Berechnungen genutzt worden sind. Die Gittergröße beträgt $(x, y, z) = (200, 200, 820) \mu\text{m}$, und die Anzahl der Gitterpunkte liegt bei $(n_{\text{grid},x}, n_{\text{grid},y}, n_{\text{slice}}) = (151, 151, 2^{13} - 2^{15})$. Die Berechnungen wurden mit 2^{15} bzw. 2^{16} Teilchen pro transversaler Ebene durchgeführt.

6.1.2. Propagation eines elektromagnetischen Feldes

Damit der BRAGG-Kristall als spektraler Filter in der numerischen Simulation berücksichtigt wird, muss das Feld mit der Transferfunktion des Filters gefaltet werden. Faltungen lassen sich als Multiplikation im FOURIER-Raum berechnen (vgl. PRESS *et al.*, 1996, S.532). Für die FOURIER-Transformationen des Feldes wird die Programmbibliothek „FFTW“ (FRIGO *et al.*, 2012) genutzt, welche die Fast-FOURIER-Transformationen (FFT) (COOLEY *et al.*, 1965) des komplexen Feldes ein- oder mehrdimensional berechnen kann. Um eine Faltung numerisch zu berechnen, müssen an die n Datenpunkte weitere n Datenpunkte mit dem Wert Null angehängt werden (vgl. PRESS *et al.*, 1996, S.532). Der Ablauf der Berechnung ist in Abb.6.1 skizziert. Aus den numerischen Parametern von GENESIS und des optischen Resonators werden die Transferfunktionen für die Propagation, Linse und Filter berechnet (siehe unten). Da für das spektrale Filtern das Lichtfeld in den Frequenzraum transformiert werden muss, können alle Berechnungen, wie die Propagation und Fokussierung, im Frequenzraum erfolgen und ebenfalls frequenz- bzw. wellenlängenabhängig durchgeführt werden, d.h. für jede transversale Ebene wird ein Propagationskern mit der entsprechenden Wellenlänge berechnet. Bei OPC wird ein Propagationskern für die Zentralwellenlänge berechnet. Es wird angenommen, dass die Transferfunktionen der Propagation, der Linse und des Filters in beiden transversalen Richtungen gleich sind. Deshalb wird für jede Transferfunktion eine zweidimensionale Matrix (transversale, longitudinale Koordinate bzw. spektrale Komponente) berechnet.

In der folgenden Schleife über die Anzahl der transversalen Scheiben (n_{slice}) die GENESIS simuliert, wird die Propagation, Fokussierung, Filterung und die Anwendung einer Blende (nicht im Programmablauf gezeigt) für jede transversale Scheibe separat berechnet.

Die Propagation wird durch eine Faltung des Feldes mit dem Integralkern der Propagation berechnet. Für diese Faltung wird das Feld in den transversalen Koordinaten FOURIER-transformiert. Nachdem das Feld in allen drei Koordinaten FOURIER-transformiert ist, wird die Transferfunktion der Propagation wellenlängenabhängig und die Transferfunktion der spektralen Filterung winkelabhängig durchgeführt.

Für die Fokussierung mit einem Hohlspiegel wird eine dünne Linse angenommen. Für die Anwendung der Transferfunktion der Linse wird das Feld in den transversalen Koordinaten zurück transformiert. Dafür wird die inverse FOURIER-Transformation in zwei Dimensionen (transversal) berechnet. Anschließend wird die Transferfunktion (Gl.6.5) der Linse wellenlängenabhängig auf das Feld angewendet. Eine Lochblende setzt das Feld für die Werte $r > r_{\text{Blende}}$ Null und wird vor der ersten Linse durchgeführt. Hat die Programmschleife alle Scheiben durchlaufen, wird das Feld zurück in den Zeitraum transformiert (1D FFT).

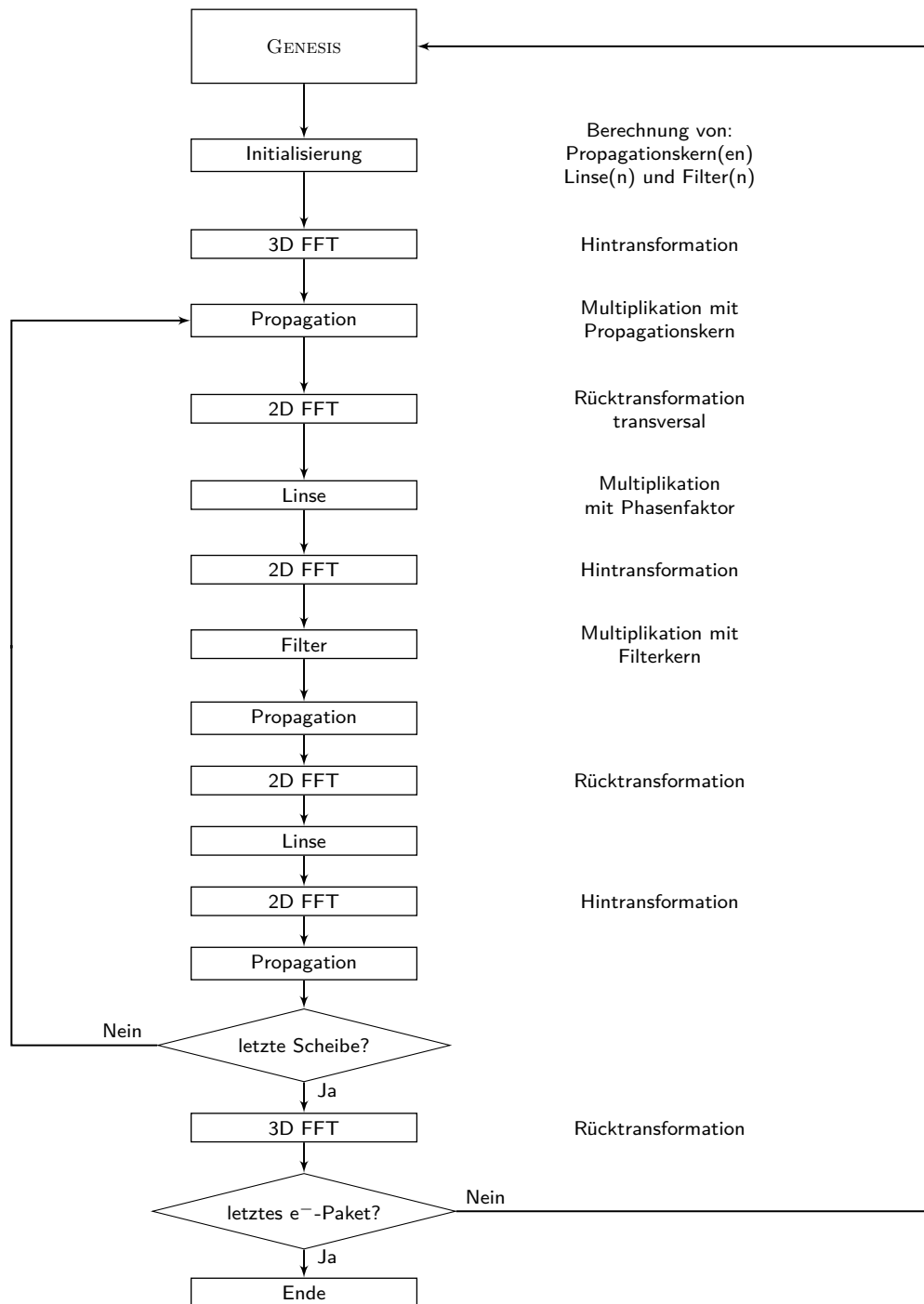


Abbildung 6.1.: Ablauf der Simulation eines XFELs mit GENESIS. Die Berechnungsschritte zur Propagation des Lichtfeldes zurück zum Undulator sind aufgeführt.

Die Berechnungen der einzelnen Transferfunktionen sind in den folgenden Abschnitten erläutert. Die Berechnung der Propagation und der Linse wurde nach KARSENBERG *et al.* (2008) berechnet und stimmen mit den Ergebnissen von OPC überein.

Propagation

Die FRESNEL-Propagation ist mathematisch gegeben als Faltung

$$E(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{K_{\text{Abs}}}{2\pi iz}} \exp\left(i \frac{K_{\text{Abs}}}{2z} (y - y')^2\right) \cdot \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{K_{\text{Abs}}}{2\pi iz}} \exp\left(i \frac{K_{\text{Abs}}}{2z} (x - x')^2\right) E(x', y', 0) dx' \right\} dy'. \quad (6.1)$$

$E(x, y, z)$ ist das elektrische Feld nach der Propagation um die Distanz z auf $E(x', y', 0)$. Der Integralkern der Faltung für die FRESNEL-Propagation

$$W(x, z) = \sqrt{\frac{K_{\text{Abs}}}{2\pi iz}} \exp\left(i \frac{K_{\text{Abs}}}{2z} x^2\right) \quad (6.2)$$

kann mit Hilfe der sin- und cos-förmigen FRESNEL-Integrale diskret berechnet werden

$$W_{j, \text{Diskret}} = \frac{1-i}{2} \begin{cases} F(\delta \cdot (j - \frac{1}{2})) & - & F(\delta \cdot (j + \frac{1}{2})) & , j < 0 \\ F(-\frac{1}{2}\delta) & + & F(\frac{1}{2}\delta) & , j = 0 \\ F(\delta \cdot (j + \frac{1}{2})) & - & F(\delta \cdot (j - \frac{1}{2})) & , j > 0, \end{cases} \quad (6.3)$$

wobei j den Index des Gitterelements beschreibt, mit $\delta = \frac{d_{\text{grid}}}{N-1} \sqrt{\frac{k}{\pi z}}$, $N_{\text{G}} = n_{\text{grid}}$ die Anzahl der Gitterpunkte, d_{grid} die transversale Ausdehnung des Gitters ist und $F(x)$ ist gegeben durch

$$F(x) = C(x) + iS(x) \text{ mit} \quad (6.4)$$

$$C(x) = \int_0^x \cos\left(\frac{\pi}{2} t^2\right) dt \quad S(x) = \int_0^x \sin\left(\frac{\pi}{2} t^2\right) dt.$$

Damit dieser Integralkern im FOURIER-Raum mit dem Lichtfeld multipliziert werden kann, muss der Integralkern der Propagation FOURIER-transformiert werden. Um ein zweidimensionales Gitter zu erhalten, werden die Werte des eindimensionalen Gitters in einer Schleife entsprechend mit sich selbst multipliziert, sodass der FRESNEL-Kern für das (x,y)-te Gitterelement berechnet werden kann.

Linse

Eine Linse ändert die Ausbreitungsrichtung des Lichts um einen ortsabhängigen Winkel $\vartheta(x, y)$. Die Winkeländerung der Ausbreitung des Lichts wird mit

$$\vartheta = -\frac{\pi}{\lambda f_{\text{L}}} (x^2 + y^2) \quad (6.5)$$

berechnet, wobei $f_L = R_L/2$ die fokale Länge der Linse (R_L Radius des Hohlspiegels), der Gitterpunkt (x,y) und λ die Wellenlänge ist. Dieser Winkel wird als komplexer Phasenfaktor ($\cos(\vartheta) + i \sin(\vartheta)$) an das Feld multipliziert.

Filter

Der spektrale Filter wird als wellenlängenabhängige Matrix mit Real- und Imaginärteil, die in einer separaten Routine berechnet werden (siehe Abschnitt 3), eingelesen. Außerhalb des berechneten Wellenlängenbereichs wird die Reflektivität Null gesetzt. Innerhalb des berechneten Wellenlängenbereichs wird der Wert der Reflektivität R_B für Real und Imaginärteil durch lineare Interpolation errechnet:

$$R_{BRe,Im}(\lambda) = R_{BRe,Im}(\lambda_1) + (\lambda - \lambda_1) \cdot \frac{R_{BRe,Im}(\lambda_2) - R_{BRe,Im}(\lambda_1)}{\lambda_2 - \lambda_1}, \quad (6.6)$$

mit λ der Wellenlänge und $\lambda_{1,2}$ der nächsten berechneten Wellenlängen der Reflexion oberhalb bzw. unterhalb von λ . Eine Berechnung der Transferfunktion ohne Interpolation der Reflexion erfordert bei Änderung der numerischen Parameter eine erneute Berechnung der Transferfunktion, welche ein MATHEMATICA-Skript berechnet. Dies macht die Handhabung des Programms unnötig aufwendig, wenn die Transferfunktion des Filters mit ausreichend hoher Auflösung berechnet wurde.

Die Winkelabhängigkeit der BRAGG-Reflexion wird erreicht, indem der Winkel $\Delta\theta$ des (x,y) -ten Gitterelements im FOURIER-Raum bestimmt wird und entsprechend die Wellenlänge des Filters für das (x,y) -te Element verschoben wird. Die Änderung wird mit dem BRAGG-Gesetz (siehe Abschnitt 3) berechnet. Die Änderung der ursprünglichen Wellenlänge um $\Delta\lambda$ wird mit Gl. 3.1 und einem anzugebenden BRAGG-Winkel θ_B berechnet

$$\Delta\lambda_W = \lambda \frac{\sin(\theta_B + \Delta\theta)}{\sin(\theta_B)}. \quad (6.7)$$

Eine Abhängigkeit von der Temperatur des Kristalls kann entsprechend berücksichtigt werden. Die relative Wellenlängenänderung (siehe Gl. 3.6) von der Temperatur wird mit dem eindimensionalen radial-symmetrischen IDL-Programm berechnet und in das Programm eingelesen. Die modifizierte Wellenlänge des Filters wird mit

$$\Delta\lambda_H = \lambda \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \quad (6.8)$$

berechnet.

Der hier vorgestellte Programmcode in C ist mit den theoretischen Funktionen des Integral-kerns für die Propagation und des Phasenfaktors der Linse verglichen worden und zusätzlich mit den Teilen von OPC, die möglich sind (Propagation und Fokussierung) überprüft worden.

6.2. Numerische Simulationen eines XFELs bei 1 Å

In diesem Abschnitt werden numerische Simulationen, die mit GINGER durchgeführt worden sind, für die Wellenlänge $\lambda_{Rad} = 1.03 \text{ Å}$ untersucht. Der dafür genutzte spektrale Filter in

Tabelle 6.1.: Parameter eines 75 fs langen Elektronenpaketes zur Erzeugung von SASE Lichtpulsen (ZAGOROTNOV, 2011). Zusätzlich sind die wichtigsten Parameter des optischen Resonators für zwei unterschiedliche Undulatorlängen angegeben.

Spitzenstrom I_P	kA	4.900	4.900
Normierte Emittanz ε_N	$\mu\text{m rad}$	1.000	1.000
Elektronenenergie E_B	GeV	14.50	14.50
Relative Energieabweichung von der Resonazenergie η	10^{-3}	2.463	2.463
Korrelierte Energieabweichung ΔE_{Korr}	MeV	10.20	10.20
Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung σ_{E_B}	MeV	0.460	0.460
Elektronenpulslänge t_B	fs	75.70	75.70
Betafunktion am Undulatoreingang $\beta_{\text{In}}=\beta_x=\beta_y$	m	15.40	10.20
Undulatorperiode λ_U	cm	3.000	3.000
Gesamtreflektivität R_{Ges}		0.874	0.920
Auskopplung		0.040	0.040
Spiegelradius r_L	m	17.40	17.40
Resonatorlänge L_{Res}	m	30.00	30.00
Undulatorlänge L_U	m	15.00	7.000

der Simulation (siehe Abschnitt 6.1) ist die Transferfunktion eines Diamantkristallpaares der Orientierung (444), bestehend aus einem dicken Kristall ($d_{\text{Krist}} = 150 \mu\text{m}$) und einem dünnen Kristall ($d_{\text{Krist}} = 42 \mu\text{m}$), der 4 % der Strahlung transmittiert (vgl. Abb. 3.3). Außerdem wird eine zusätzliche Absorption von etwa 6 % angenommen, die zum Beispiel der Absorption der fokussierenden Spiegel Rechnung tragen soll. Bei einigen Simulationen wird eine geringere Absorption angenommen. Die Länge des Resonators spielt bei den Berechnungen eine untergeordnete Rolle, da Strahlgröße und Divergenz des Lichtfeldes am Anfang des Resonators die entscheidenden Parameter sind. Durch eine geeignete Wahl der fokalen Länge der Spiegel und des Spiegelabstandes kann das Strahlprofil im Resonator für unterschiedlich lange Resonatoren erfüllt werden. Eine vergleichende Berechnungen wurde mit GENESIS durchgeführt.

6.2.1. 75 fs langer SASE-typischer Elektronenpuls des European XFELs

Der European XFEL wird Elektronenpakete mit $q = 1 \text{ nC}$ beschleunigen, die nach der Kompression etwa $t_B = 75 \text{ fs}$ lang sind, die als Standardelektronen angegeben sind. Weitere Operationsmodi mit kleineren Ladungen und kürzeren Elektronenpaketen sind geplant. Kürzere Pulse haben den Nachteil, dass ein FOURIER-limitierter Photonpuls eine breitere spektrale Verteilung aufweist, als sie der eingesetzte Diamantkristall hat. Weitere Parameter des etwa $t_B = 75 \text{ fs}$ langen Pulses der numerischen Simulation sind in Tab. 6.1 zusammengefasst.

Eine der entscheidenden Größen ist die Sättigungsenergie, da sie die Anzahl der Photonen im Puls bestimmt und mit der Länge des Pulses, der Quellgröße, der Divergenz und der spektralen Bandbreite die Brillanz definiert. Ein XFEL mit maximaler Sättigungsenergie ist in Abb. 6.2 gezeigt. Abbildung 6.2a zeigt die Photonpulsenergie in Abhängigkeit von der Anzahl der Umläufe des Lichtpulses im Resonator. Sättigung wird nach etwa 60 Resonatorumläufen

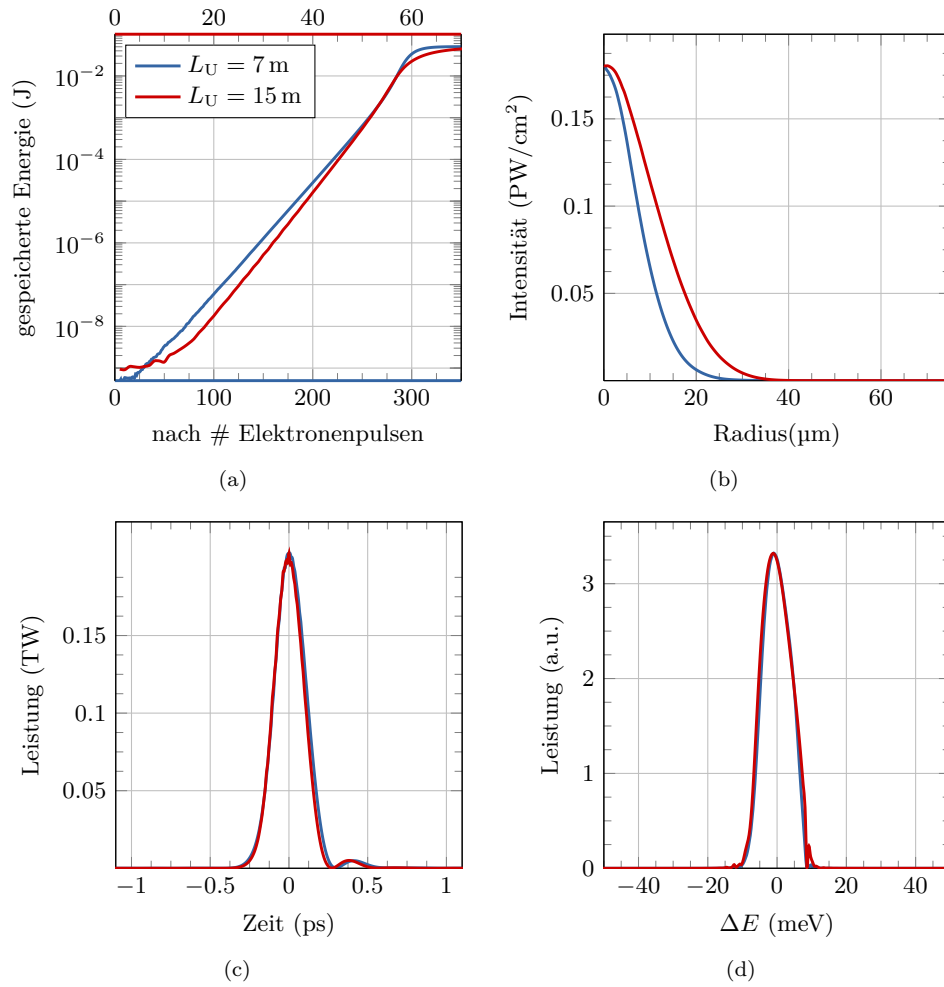


Abbildung 6.2.: Numerische Simulation eines XFELs durchgeführt mit GINGER getrieben mit einem 75 fs langen SASE-typischen Elektronenpaket für eine maximale Sättigungsenergie. (a) Gespeicherte Pulsenergie im Resonator in Abhängigkeit von der Anzahl des Undulatordurchlaufs. (b) Intensität in Abhängigkeit vom radialen Abstand von der Undulatorachse. (c) Gespeicherte Photonpulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Zeit. (d) Gespeicherte Photonpulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Frequenz.

erreicht, wenn ein 15 m langer Undulator genutzt wird. Es kann ein noch kürzerer 7 m langer Undulator genutzt werden. Die Anzahl der Umläufe bis zur Sättigung steigt in diesem Fall auf etwa 300, wobei die angenommene zusätzliche Absorption (z.B. fokussierende Spiegel) in der Berechnung auf 4 % reduziert ist. Die Sättigungsenergie liegt für beide Undulatorlängen bei $E_{\text{Sat}} \approx 50$ mJ. Sie liegt etwas höher im Fall des längeren Undulators. Näherungsweise ist die Sättigungsleistung der Photonen in einem FEL von der Strahlleistung der Elektronen und dem FEL-Parameter abhängig (DOHLUS *et al.*, 2008, S. 70). Der FEL-Parameter ist im Fall des kürzeren Undulators etwas größer (siehe Tab. 6.2), aber nur, da die mittlere Dichte der Elektronen innerhalb des Undulators im Fall des kürzeren Undulators höher ist und somit auch der FEL-Parameter. Das führt zu einer höheren Sättigungsenergie für den längeren Undulator, obwohl der FEL-Parameter kleiner ist. Abbildung 6.2b zeigt das radiale Pulsprofil am Ende des Undulators, welches nahezu GAUSSförmig ist. Der Unterschied der beiden radialen Profile ist auf die unterschiedlich langen Undulatoren zurückzuführen. Der Kohärenzradius (vgl. Gl. 2.48) ist mit $r_{\text{Koh}} = 22.1 \mu\text{m}$ bzw. $r_{\text{Koh}} = 22.3 \mu\text{m}$ etwas kleiner als die transversale Strahlgröße an dieser Position im Resonator. Der Strahlungspuls ist somit fast vollständig transversal kohärent.

In Abb. 6.2c,d sind die Lichtpulse in der Zeit- bzw. Frequenzdomäne dargestellt. Die Lichtpulse sind zwischen $t_{\text{Phot}} = 220$ fs und $t_{\text{Phot}} = 230$ fs lang und haben eine nahezu identische Pulsform und Leistung. Der nachlaufende kleinere Strahlungspuls etwa 300 fs nach dem Hauptpuls tritt aufgrund von Reflexion an der Rückseite des dünnen BRAGG-Kristalls auf, mit dem ein Teil der Pulsenergie des umlaufenden Lichtpulses aus dem Resonator ausgekoppelt wird (LINDBERG *et al.*, 2011). In den Simulationen wird ein etwa $d_{\text{Krist}} \approx 42 \mu\text{m}$ dicker BRAGG-Kristall zur Auskopplung angenommen ($2 \cdot d_{\text{Krist}}/c_0 \approx 280$ fs). Dies stimmt mit dem Zeitabstand des nachlaufenden Lichtpulses gut überein. Der erzeugte Puls hat eine relative Frequenzbreite von etwa $\Delta\lambda/\lambda = 9.6 \cdot 10^{-7}$ (rms) bzw. $\Delta\lambda/\lambda = 8.9 \cdot 10^{-7}$ (rms). Die erzeugten Pulse haben eine Kohärenzzeit von $\tau_{\text{Koh}} = 280$ fs bzw. $\tau_{\text{Koh}} = 300$ fs und sind somit über die gesamte Pulslänge longitudinal kohärent. Weitere Parameter der Lichtpulse sind in Tab. 6.2 zusammengefasst.

Prinzipiell ließe sich ein XFEL mit den Standardparameter des European XFEL, einem 7 m langen Undulator und einem Resonator aufgebaut aus Diamantkristallen mit einer Gesamtreflektivität von 92 % betreiben, der eine maximale Sättigungsenergie von 50 mJ aufweist, wobei 4 % ausgekoppelt werden. Die absorbierte Energie der Photonenpulse führt aber zu einer Änderung der BRAGG-Energie (vgl. Kap. 4) oder einer Zerstörung des Kristalls (bei einem Temperaturunterschied von 3550 K bricht Diamant (SINN, 2006)). In den oben gezeigten Fällen nimmt die Temperatur des Kristalls nach dem ersten Puls um 800 K zu, wenn 1 % Absorption im Diamantkristall angenommen wird (SHVYD'KO *et al.*, 2010). Ein Pulszug mit Photonpuls mit einer Energie 50 mJ würde den Kristall bis zur Zerstörung erwärmen, wenn nicht vorher die Änderung der Wellenlänge aufgrund der Erwärmung des Kristalls so groß werden würde, dass der umlaufende Photonpuls niemals bis zur Sättigung verstärkt wird.

Eine geringere Sättigungsenergie eines XFELs kann erreicht werden, in dem die relative Energieabweichung von der Resonanzenergie kleiner gewählt wird. Dies ist in einem XFEL zu erreichen, denn die Transmission des Resonators wird durch den BRAGG-Winkel bestimmt. Elektronenenergie oder Undulatorparameter können davon unabhängig eingestellt werden, so dass die relative Energieabweichung von der Resonanzenergie einstellbar ist. Wie auch für den Fall der maximalen Sättigungsenergie ist die Verstärkung im Fall einer geringen Sätti-

Tabelle 6.2.: Photonpulsparameter der numerischen Simulation eines XFELs getrieben mit einem 75 fs langen SASE-typischen Elektronenpaketes für zwei unterschiedliche Undulatorlängen für eine maximale Sättigungsenergie.

Undulatorlänge L_U	m	15.00	7.000
Gespeicherte Photonenpulsenenergie E_{Phot}	mJ	47.30	46.60
Wellenlänge λ_{Rad}	nm	0.103	0.103
Verstärkung pro Undulatorendurchlauf G_{max}		0.558	0.110
FEL-Parameter ρ_{FEL}	10^{-4}	5.550	6.360
Photonpulslänge (FWHM) t_{Phot}	fs	220.0	230.0
Bandbreite $\Delta\lambda$	10^{-17} m	9.880	9.160
Relative Bandbreite $\Delta\lambda/\lambda$	10^{-7}	9.600	8.900
Zeit-Bandbreiten Produkt TBP		0.612	0.600
Kohärenzzeit τ_{Koh}	fs	280.0	310.0
Kohärenzradius r_{Koh}	μm	22.10	22.30
Spitzenbrillanz der ausgekoppelten Photonen PB	$10^{36} \cdot \text{B}^1$	1.700	1.800
Strahltaille in der Undulatorenmittle ω_0	μm	14.00	14.00
Strahlradius am Kristall ω_{Kris}	μm	37.80	37.80

¹ Photonen/s/mm²/mrad²/0.1 % Bandbreite

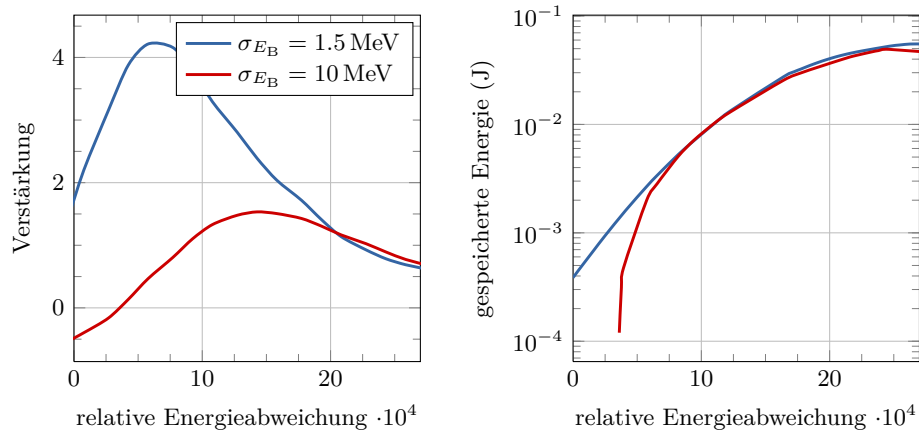


Abbildung 6.3.: Links: Verstärkung in Abhängigkeit von der relativen Energieabweichung für einen 15 m langen Undulator. Rechts: Gespeicherte Energie im Resonator bei Sättigung in Abhängigkeit von der relativen Energieabweichung.

gungsenergie nicht maximal. Für eine kleinere gespeicherte Energie im Resonator wird eine relative Energieabweichung $\eta = 0$ genutzt. In diesem Fall ist die Sättigungsenergie mehr als zwei Größenordnungen kleiner, wenn eine Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung von $\sigma_{E_B} = 1.5$ MeV angenommen wird. Die Berechnungen mit dieser Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung entspricht einem „frischen“ Elektronenpaket, dessen Eigenschaften mit denen direkt hinter den Beschleunigungsstrukturen übereinstimmen. Ein zweiter Fall mit einer erhöhten Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung entspricht dem eines Elektronenpakets hinter einem der SASE-Undulatoren nach Abstrahlung eines SASE-Pulses. In Abbildung 6.3 ist dieser Zusammenhang für ein Ladungspaket mit einer Ladung von 1 nC für eine Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung von $\sigma_{E_B} = 1.5$ MeV (blau) und $\sigma_{E_B} = 10$ MeV (rot) dargestellt.

Abbildung 6.4 zeigt eine numerische Simulation für einen XFEL mit einer kleineren (ZAGOROTNOV, 2011) und größeren (SASE-Puls generierten) Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung σ_{E_B} bei einer möglichst kleinen relativen Energieabweichung η . Es werden zwei unterschiedliche relative Energieabweichungen betrachtet. Für den Fall der kleineren Standardabweichung $\sigma_{E_B} = 1.5$ MeV ist die relative Energieabweichung $\eta = 0$ und für die größere Standardabweichung $\sigma_{E_B} = 10.0$ MeV beträgt $\eta = 3.60 \cdot 10^{-4}$, da sonst die Verstärkung zu gering ist, um einen XFEL zu betreiben. Im Vergleich zu einem XFEL mit großer relativer Energieabweichung η (vgl. Tab. 6.1 und Abb. 6.2) unterscheiden sich die erzeugten Lichtpulse deutlich. Zunächst ist die Sättigungsenergie im Fall $\sigma_{E_B} = 10.0$ MeV kleiner als die für $\sigma_{E_B} = 1.5$ MeV. Das liegt daran, dass weniger Elektronen an der Verstärkung teilnehmen, da ein Teil der Elektronen außerhalb der Bandbreite der Verstärkung liegt. Die radiale Pulsform weicht bei dieser Berechnung von einer GAUSSform ab. Dies ist wahrscheinlich darauf zurückzuführen, dass der Untergrund, der von jedem Elektronenpaket erzeugt wird, einen größeren Beitrag zu der Sättigungsenergie leistet, als im Fall der höheren Sättigungsenergie und dieser nicht transversal kohärent ist (DOHLUS *et al.*, 2008, S. 119).

In der Zeit- bzw. Frequenzdomäne weisen die Pulse spitze Strukturen an den Flanken des Spektrums bzw. am Maximum des Pulses auf. Im Vergleich zu Abb. 6.2c sind die Pulse etwa nur halb so lang und haben dementsprechend ein breiteres Frequenzspektrum. Deutlich zu erkennen sind die im Spektrum auftretenden Frequenzspitzen an den Flanken des Pulses. Die unterschiedlich starken Ausprägungen der Störungen sind ein Resultat der Asymmetrie der Reflexion des BRAGG-Kristalls (siehe Abb. 3.3).

6.2.2. XFEL unter Berücksichtigung von Wärmelasteffekten am Bragg-Kristall

In diesem Abschnitt werden Berechnungen, die mit dem entwickelten Propagationsprogramm und GENESIS durchgeführt worden sind, diskutiert. An dieser Stelle wird ein Vergleich zwischen Berechnungen mit GINGER und GENESIS vorgestellt. Die beiden GENESIS-Fälle unterscheiden sich durch die Berücksichtigung der Wärmelast auf den BRAGG-Kristallen. Im ersten Fall wird sie, wie in den GINGER-Berechnungen, nicht berücksichtigt. Die zweite GENESIS-Berechnung berücksichtigt die Wärmelast auf dem Kristall durch die Berechnung der Temperaturänderung der Kristalle mit dem zuvor vorgestellten Programm zur Berechnung der Temperatur in Kristallen, das in die Programmschleife mit einbezogen worden ist. Es wurde aufgrund der Berechnungsdauer ein eindimensional radial-symmetrisches Programm genutzt, welches bis auf

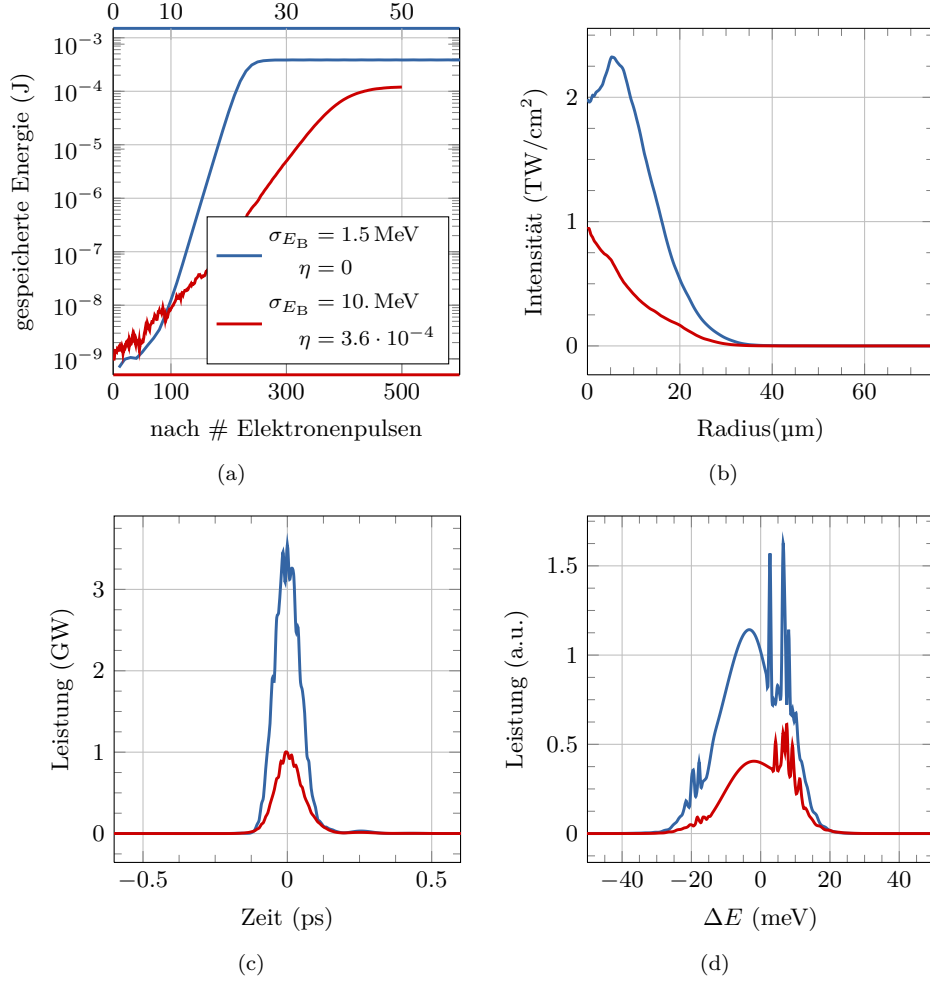


Abbildung 6.4.: Numerische Simulation eines XFELs mit einem 75 fs langen SASE-typischen Elektronenpaket mit (blau) einer relativen Energieabweichung von der Resonanzenergie $\eta = 0$ und einer geringeren Standardabweichung von der Elektronenenergieverteilung $\sigma_{E_B} = 1.5 \text{ MeV}$ und (rot) einer relativen Energieabweichung von der Resonanzenergie $\eta = 3.60 \cdot 10^{-4}$ und einer größeren Standardabweichung von der Elektronenenergieverteilung $\sigma_{E_B} = 10 \text{ MeV}$. (a) Gespeicherte Pulsenergie im Resonator in Abhängigkeit von der Anzahl des Undulatordurchlaufs. (b) Intensität in Abhängigkeit vom radialen Abstand von der Undulatorachse. (c) Gespeicherte Photonpulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Zeit. (d) Gespeicherte Photonpulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Frequenz.

Tabelle 6.3.: Photonpulspulparameter eines XFELs getrieben mit einem 75 fs langen Elektronenpaket vor und nach der Generation eines SASE-Lichtpulses mit geringer relativer Energieabweichung und geringerer Sättigungsenergie des Photonpulses.

Unkorrelierte Energieabweichung σ_{E_B}	MeV	1.500	10.20
Gespeicherte Photonenpulsenenergie E_{Phot}	mJ	0.386	0.120
Wellenlänge λ_{Rad}	nm	0.103	0.103
Verstärkung pro Undulatordurchlauf G_{max}		1.300	0.100
FEL-Parameter ρ_{FEL}	10^{-4}	5.560	5.560
Photonpulslänge (FWHM) t_{Phot}	fs	110.0	110.0
Bandbreite (FWHM) $\Delta\lambda$	10^{-16} m	2.110	1.990
Relative Bandbreite $\Delta\lambda/\lambda$	10^{-6}	2.040	1.930
Zeit-Bandbreiten Produkt TBP		0.626	0.592
Kohärenzzeit τ_{Koh}	fs	68.37	72.08
Kohärenzradius r_{Koh}	µm	13.02	13.54
Spitzenbrillanz der ausgekoppelten Photonen PB	10^{34} B ¹	1.400	0.400
Strahltaile in der Undulatormitte ω_0	µm	14.00	14.00
Strahlradius am Kristall ω_{Krist}	µm	37.80	37.80

¹ Photonen/s/mm²/mrad²/0.1 % Bandbreite

die zweite Dimension die gleiche Berechnungsgrundlage hat. Für GENESIS werden zwei Kristall-Transferfunktion genutzt, um den unterschiedlichen Kristalltemperaturen Rechnung tragen zu können. Der dünnere Kristall zur Auskopplung der Strahlung absorbiert bei jedem Puls einen weiteren Puls, der die spontane Undulatorstrahlung darstellen soll. Die absorbierte Energie dieses zweiten Pulses entspricht dabei der absorbierten Energie der spontanen Undulatorstrahlung aus Abschnitt 7. Die absorbierte Energie der XFEL-Strahlung wird spektral abhängig berechnet, indem die Reflexion und Transmission der jeweiligen Kristalle addiert werden. Diese absorbierte Energie wird von dem IDL-Programm zur Berechnung der Temperatur eingelesen und zur vorangegangenen Energieverteilung (Temperaturverteilung) addiert. Es werden drei Berechnungen für eine relativen Energieabweichung von $\eta = 2.45 \cdot 10^{-4}$ in Abb. 6.5 gezeigt. Die Elektronenstrahlparameter sind in Tab. 6.1 aufgeführt. Es wird keine longitudinale Energiekorrelation angenommen. Die Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung beträgt $\sigma_{E_B} = 1.5$ MeV.

Abbildung 6.5a zeigt die gespeicherte Pulsenergie in Abhängigkeit von der Anzahl der Resonatordurchläufe. Die Verstärkung pro Undulatordurchlauf der Berechnung mit GINGER ist mit $G_{\text{max}} = 3.12$ deutlich höher als die Verstärkung der GENESIS-Berechnungen, die bei $G_{\text{max}} = 1.82$ liegt. Verglichen mit der Verstärkungslänge $L_G = 4.38$ m mit einer mittleren Betafunktion von $\beta_M \approx 15$ m ($G_{\text{max}} \approx 30$) ist die Verstärkung klein. Das liegt an dem Lethargieregime innerhalb der ersten Verstärkungslängen. Innerhalb dieser Strecke wird der Lichtpuls nicht wesentlich verstärkt, wird ein $\eta = 0$ angenommen. Im Fall von $\eta \neq 0$ (siehe Abb. 2.8) ist die Verstärkung geringer und in den dargestellten Fällen ist die Strecke im Undulator ohne wesentliche Verstärkung etwa halb so lang. Werden von der Länge des Undulators zwei Verstärkungslängen subtrahiert, beträgt die Verstärkung pro Undulatordurchgang etwa $G_{\text{max}} \approx 4$, welches der von

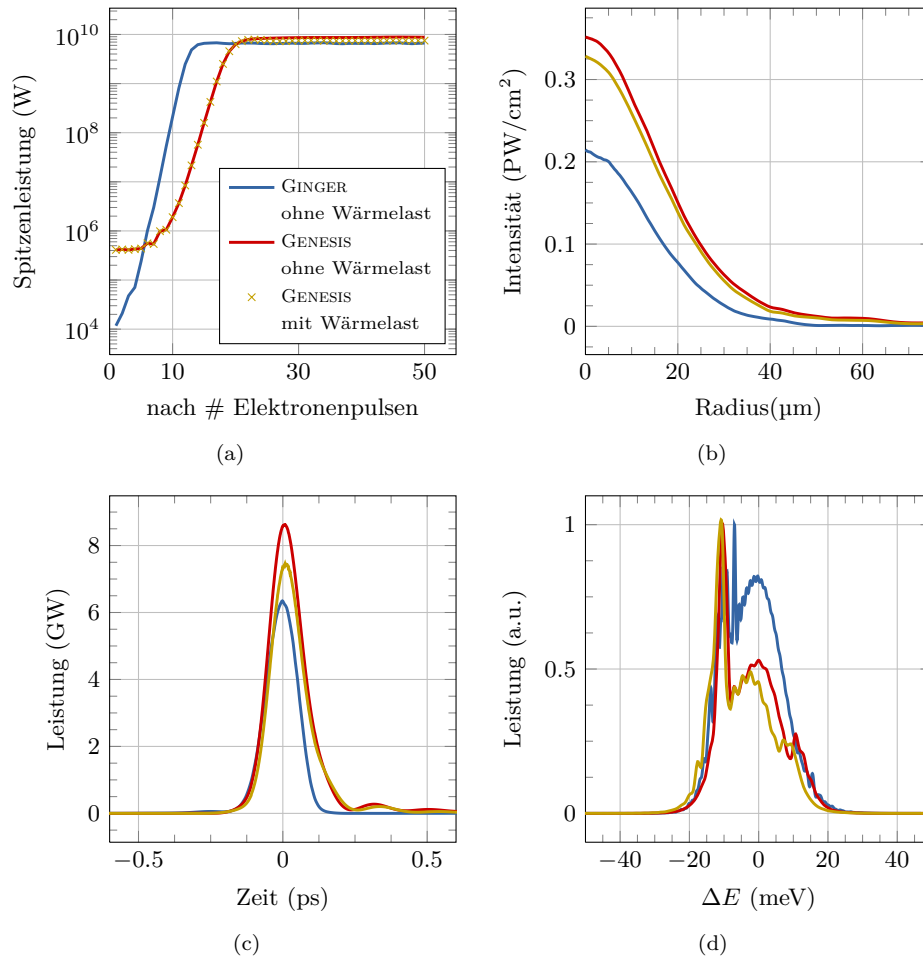


Abbildung 6.5.: Numerische Simulation eines XFELs unter Berücksichtigung der Wärmelast mit einem 75 fs langen SASE-typischen Elektronenpaket für ein $\eta = 2.45 \cdot 10^{-4}$. Es werden drei verschiedene Fälle, GINGER-Berechnung, GENESIS-Berechnung ohne und mit Berücksichtigung der Wärmelast betrachtet. (a) Gespeicherte Pulsenergie im Resonator in Abhängigkeit von der Anzahl des Undulatordurchlaufs. (b) Intensität in Abhängigkeit von radialen Abstand von der Undulatorachse. (c) Gespeicherte Photonpulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Zeit. (d) Gespeicherte Photonpulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Frequenz.

GINGER berechneten Verstärkung auf 33 % entspricht, wobei die Verluste der Spiegelanordnung in der Berechnung der Verstärkung von GINGER nicht berücksichtigt worden sind.

In den GINGER-Berechnungen ist die Spitzenleistung in Sättigung

$$P_{Peak} = 6.6 \text{ GW} \pm 0.08 \text{ GW}.$$

Der Fehler ist die Standardabweichung der Pulsleistung ab dem 25. Undulatordurchlauf, wie es im Folgenden auch der Fall ist. Die Berechnungen mit GENESIS ergeben in Sättigung eine Spitzenleistung etwas oberhalb der von GINGER berechneten Spitzenleistung

$$\text{ohne Wärmelast } P_{Peak} = 8.6 \text{ GW} \pm 0.13 \text{ GW}$$

$$\text{mit Wärmelast } P_{Peak} = 7.5 \text{ GW} \pm 0.70 \text{ GW}.$$

Unter Berücksichtigung der Wärmelast ist die Spitzenleistung in Sättigung etwas geringer. Das liegt an der etwas geringeren Pulsleistung des zurück in den Undulator reflektierten Pulses, da sich die Transferfunktionen der BRAGG-Kristalle gegeneinander bei unterschiedlicher Erwärmung verschieben (siehe Abb. 6.6). Ein Vergleich zwischen der Berechnung des XFELs mit GINGER und GENESIS zeigt, dass die Größenordnung der Sättigungsleistung stimmen aber sie nicht innerhalb der berechneten Fehler liegen.

Das radiale Pulsprofil in Sättigung ist für alle Berechnungen nahezu GAUSSförmig. Die maximale Intensität unterscheidet sich aufgrund der unterschiedlichen Spitzenleistungen. Die Pulsbreiten sind für GINGER

$$\sigma_R = 13.7 \pm 0.7 \mu\text{m}.$$

Das dargestellte radiale Pulsprofil zeigt am Maximum eine Abflachung (siehe Abb. 6.5b). Die dargestellten radialen Pulsprofile sind das Mittel über die letzten 30 Pulse in Sättigung. Die von GENESIS berechneten Pulsprofile haben eine nahezu perfekte GAUSSform. Die Pulsbreite der GENESIS-Berechnungen sind wie folgt berechnet

$$\text{ohne Wärmelast } \sigma_R = 15.8 \mu\text{m} \pm 0.03 \mu\text{m}$$

$$\text{mit Wärmelast } \sigma_R = 16.0 \mu\text{m} \pm 0.10 \mu\text{m}$$

und somit ist das transversale Pulsprofil etwas breiter als das von GINGER berechnete und liegt nicht mehr in dem berechneten Fehler.

Die über die letzten 30 Pulse in Sättigung gemittelte Leistung in Abhängigkeit von der Zeit ist in Abb. 6.5c dargestellt. Der von GINGER berechnete Puls ist nahezu GAUSSförmig. Die Länge des Photonpulses beträgt im Fall der GINGER-Berechnung

$$t_{\text{Phot}} = 55 \text{ fs} \pm 1.3 \text{ fs(rms)}.$$

Die GENESIS-Berechnungen ergeben eine Pulslänge von

$$\text{ohne Wärmelast } \sigma_R = 55.7 \text{ fs} \pm 0.2 \text{ fs}$$

$$\text{mit Wärmelast } \sigma_R = 57.6 \text{ fs} \pm 0.5 \text{ fs}.$$

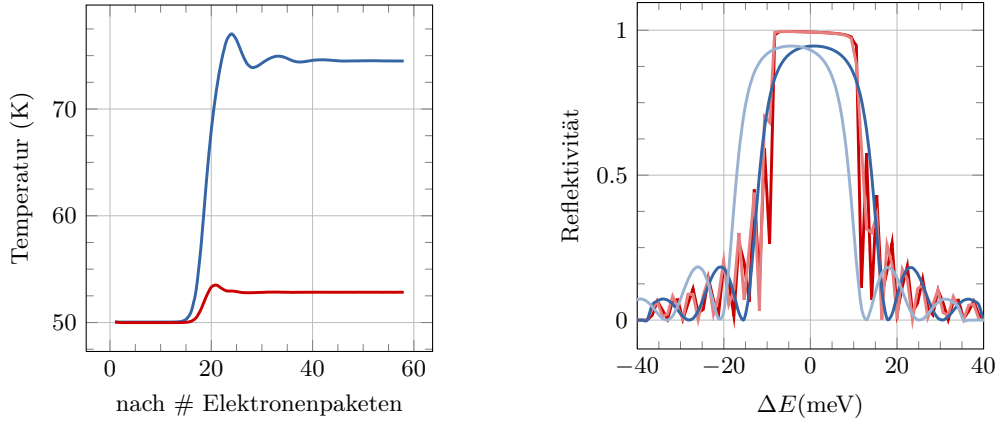


Abbildung 6.6.: Links: Temperatur der beiden BRAGG-Kristalle in Abhängigkeit von dem Undulatordurchlauf mit einer Anfangstemperatur der Kristalle von $T_0 = 50$ K. In Blau dargestellt ist der dünnere Kristall mit $d_{\text{Krist}} = 42 \mu\text{m}$ und Rot der dickere Kristall mit $d_{\text{Krist}} = 150 \mu\text{m}$. Die Temperatur der Kristalle wird mit dem eindimensionalen radial-symmetrischen IDL-Programm berechnet, wobei die absorbierte Energie wellenlängenabhängig berechnet wird. Rechts: Absolutbetrag der Transferfunktion des dünnere Kristalls (blau) und des dickeren Kristalls (rot) in Abhängigkeit von der Abweichung der Photonenenergie. Die hellfarbenden Kurven zeigen die modifizierte Transferfunktion aufgrund der Erwärmung der Kristalle.

Die Länge des von GINGER und GENESIS ohne Berücksichtigung der Wärmelast berechneten Pulses liegen innerhalb der berechneten Fehler.

Der Photonpuls der GENESIS-Berechnung hat einen nachlaufenden Photonpuls, der der Reflexion an der Rückseite des dünnere Kristalls zugeordnet werden kann.

Das über die letzten 30 Pulse gemittelte Spektrum in Abhängigkeit von der Photonenenergie bezogen auf die BRAGG-Photonenenergie E_{Phot} des Pulses ist in Abb. 6.5d gezeigt. Das Spektrum weist dieselben durch die Transferfunktionen der Kristalle hervorgerufenen Muster auf. Das Spektrum der GENESIS-Berechnung ohne Berücksichtigung der Wärmelast auf den Kristallen weist dieselben Strukturen der GINGER-Berechnung auf. Die spektrale Breite des Pulses der GINGER-Berechnung beträgt

$$\sigma_E = 8.2 \text{ meV} \pm 6 \mu\text{eV}.$$

Die spektrale Breite der Pulse der GENESIS-Berechnungen betragen

$$\begin{aligned} \text{ohne Wärmelast } \sigma_E &= 8.8 \text{ meV} \pm 30 \mu\text{eV} \\ \text{mit Wärmelast } \sigma_E &= 9.4 \text{ meV} \pm 0.6 \text{ meV}. \end{aligned}$$

Für die beiden GENESIS-Berechnungen liegen die Werte der spektralen Breite des Pulses innerhalb der Standardabweichung. Im Fall der GINGER-Berechnung liegen die Werte der spektralen Breite der Pulse außerhalb der Standardabweichung der von GENESIS berechneten Werte.

In Abb. 6.6 (links) ist die Temperatur der Kristalle vor Absorption des folgenden Photonpulses dargestellt. Die Ausgangstemperatur der Kristalle beträgt $T_0 = 50$ K. Diese Kristalltempe-

ratur ist notwendig, damit die relative Änderung der Zentralwellenlänge der BRAGG-Reflexion innerhalb des zweiten Kristalls bleibt (siehe Abb. 6.6 (rechts)). Der Unterschied der Kristalltemperaturen ist durch die unterschiedlichen Kristalldicken bedingt. Die Wärmeleitung verringert sich, wenn die Kristalldicke reduziert wird (siehe Kap. 7).

An dieser Stelle muss erwähnt werden, dass die eindimensionale radiale-symmetrische Berechnung der Temperatur eine zu geringe Temperaturänderung im Kristall berechnet, verglichen mit der zweidimensionalen Berechnung der Temperatur (siehe nächstes Kapitel). Aufgrund des Zeitaufwands der Berechnung in zwei Dimensionen wurde dieser Fehler bewusst hingenommen. Die Folge ist, dass eine höhere Sättigungsenergie des XFELs tolerierbar ist. Der Einfluss auf die Gitterstruktur des Kristalls und damit der Störung des Kristallgitters ist nicht in den Transferfunktionen der Kristalle beinhaltet. Unterschiede zwischen den beiden Berechnungen können sich aus den unterschiedlichen numerischen Parametern ergeben, die genutzt worden sind.

6.2.3. Elektronenpuls mit 100 pC Ladung

Exemplarisch für Elektronenpakete mit kleinerer Ladung wird ein SASE-typisches Elektronenpaket mit einer Ladung von $q = 100$ pC betrachtet, dessen Länge $t_B = 5$ fs (rms) mit einem Spitzenstrom $I_P = 5$ kA und einem weniger stark komprimierten Ladungspaket mit einer Länge von $t_B = 60$ fs mit einem Spitzenstrom von etwa $I_P = 665$ A beträgt. In Tab. 6.4 sind die Elektronenparameter der Berechnungen, durchgeführt mit GINGER, aufgelistet.

Die Sättigungsenergie des 5 fs langen Elektronenpulses beträgt $E_{\text{Sat}} \approx 289$ µJ und ist um zwei Größenordnungen kleiner als die Sättigungsenergie erzeugt mit einem 1 nC Elektronenpaket (vgl. Abb. 6.2 mit 6.7a). Das liegt zum einen an der geringeren Ladung und zum anderen an den unterschiedlichen relativen Energieabweichungen von der Resonanzenergie. Die zeitliche Pulsform (siehe Abb. 6.7c) und das Frequenzspektrum (siehe Abb. 6.7d) sind nahezu GAUSSförmig. Bei $\Delta E = 0$ ist das Frequenzspektrum gestört. Die Ursache ist der BRAGG-Kristall, der in diesem Frequenzbereich ein, verglichen zu der Breite des Frequenzspektrums des Pulses, schmales Band reflektiert und so das Frequenzspektrum nur an dieser Stelle beeinflusst.

Der umlaufende Lichtpuls hat direkt vor dem Undulator eine Bandbreite entsprechend des BRAGG-Kristalls. Das ist etwa eine Größenordnung kleiner als die FOURIER-limitierte Bandbreite eines Lichtpulses einer Länge von 5 fs

$$\left(\frac{\Delta\lambda}{\lambda}\right)_{\text{BRAGG}} = 1.66 \cdot 10^{-6} \qquad \left(\frac{\Delta\lambda}{\lambda}\right)_{5 \text{ fs}} = 1.29 \cdot 10^{-5}. \quad (6.9)$$

Dieser schmalbandigere Lichtpuls wird im Undulator verstärkt. Das Elektronenpaket kann keine Lichtpulse erzeugen, die länger sind als es selbst ist, sodass die Frequenzbreite durch die Länge des Elektronenpakets (vgl. Gl. 6.9) bestimmt wird und in diesem Fall nicht mit der Bandbreite des BRAGG-Kristalls übereinstimmt. Die Bandbreite des Spektrums der Lichtpulse eines XFELs betrieben mit einem 5 fs langen Elektronenpaket ist etwa eine Größenordnung breiter, als die eines BRAGG-Kristalls aus Diamant bei $E_{\text{Phot}} \approx 12$ keV.

Die Eindringtiefe der Lichtpulse mit einer im Vergleich zu einem $t_B \approx 75$ fs langen Elektronenpaket zehnfach größeren Bandbreite wird hauptsächlich durch die Photoabsorptionslänge (vgl. Gl. 3.37) bestimmt. Der Anteil der Wellenlängen, die außerhalb der BRAGG-Reflexion liegen, machen etwa 94 % der Pulsenergie aus. Da diese Photoabsorptionslänge für Diamant bei 1 Å

Tabelle 6.4.: Parameter für ein 5 fs langes SASE-Elektronenpaket und ein 60 fs langes Elektronenpaket (ZAGOROTNOV, 2011).

Spitzenstrom I_P	kA	5.000	0.665
Normierte Emittanz ε_N	μrad	0.300	0.300
Elektronenenergie E_B	GeV	14.50	14.50
Korrelierte Energieabweichung ΔE_{Korr}	MeV	21.00	10.20
Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung σ_{E_B}	MeV	2.040	0.665
Elektronenpulslänge t_B	fs	5.1100	60.00
Relative Energieabweichung η	10^{-4}	5.245	3.228
Betafunktion am Undulatoreingang β_{In}	m	15.40	15.40
Undulatorperiode λ_U	m	0.030	0.030
Gesamtreflektivität R_{Ges}		0.874	0.917
Spiegelradius r_L	m	17.40	17.40
Resonatorlänge L_{Res}	m	30.00	30.00
Undulatorlänge L_U	m	15.00	15.00

etwa 2.0 mm (siehe Abb. 3.5) beträgt, wird etwa 2 % der Pulsenergie für einen 42 μm dicken Kristall absorbiert. In diesem Fall wird mehr Energie vom Kristall absorbiert als für einen Puls dessen Bandbreite kleiner als die des BRAGG-Kristalls ist. Es ist unter dem Aspekt einer geringen Absorption von Energie günstiger einen längeren schmalbandigeren Puls gleicher Energie zu erzeugen als einen mit größerer Bandbreite.

Einen XFELo getrieben mit diesem idealisierten 5 fs langen Elektronenpaket erzeugt einen fast vollständig kohärenten Strahlungspuls. Das Niveau der Sättigungsenergie liegt in einem Bereich, in dem sich die BRAGG-Kristalle (Diamant) nicht zu stark erwärmen (siehe Kapitel 7), um noch innerhalb der Energiebreite der BRAGG-Reflexion reflektierend zu wirken.

Zudem hängt die abgestrahlte Leistung der inkohärenten Undulatorstrahlung linear mit der Ladung des Elektronenpaket zusammen, was eine geringere Wärmelast auf dem Kristall um eine Größenordnung im Vergleich zu einem Ladungspaket mit 1 nC bedeutet.

Das 60 fs lange Elektronenpaket erzeugt einen entsprechend längeren Photonpuls, der der Energiebreite der BRAGG-Reflexion entspricht (siehe Abb. 6.7c), dessen Eigenschaften ebenfalls in Tab. 6.5 aufgelistet sind. Die Sättigungsenergie ist etwas kleiner als die des kürzeren Pulses. Ein Grund hierfür ist die unterschiedliche relative Energieabweichung von der Resonanzenergie η . In Abbildung 6.7b ist das nahezu GAUSSförmige transversale Pulsprofil gezeigt. Aus dieser Berechnung folgt, dass ein 60 fs langes Elektronenpaket einen schmalbandigen Photonpuls mit einer Breite von $\Delta\lambda/\lambda \approx 5.9 \cdot 10^{-7}$ (FWHM) erzeugt, der von einem weiteren Puls geringer Intensität mit einer Bandbreite von $\Delta\lambda/\lambda \approx 2.0 \cdot 10^{-6}$ überlagert ist. Der gespeicherte Photonpuls besitzt eine geringere Bandbreite als der vom Elektronenpaket erzeugte. Der ausgekoppelte Anteil des Lichtpuls besitzt eine Spitzenbrillanz von $P_{\text{Peak}} > 10^{34} \text{ B}$, und liegt damit knapp eine Größenordnung oberhalb der Spitzenbrillanz eines SASE-Lichtpulses des European XFELs (ALTARELLI *et al.*, 2007).

Unter thermischen Gesichtspunkten ist es günstiger, einen nicht SASE-Elektronenpuls mit

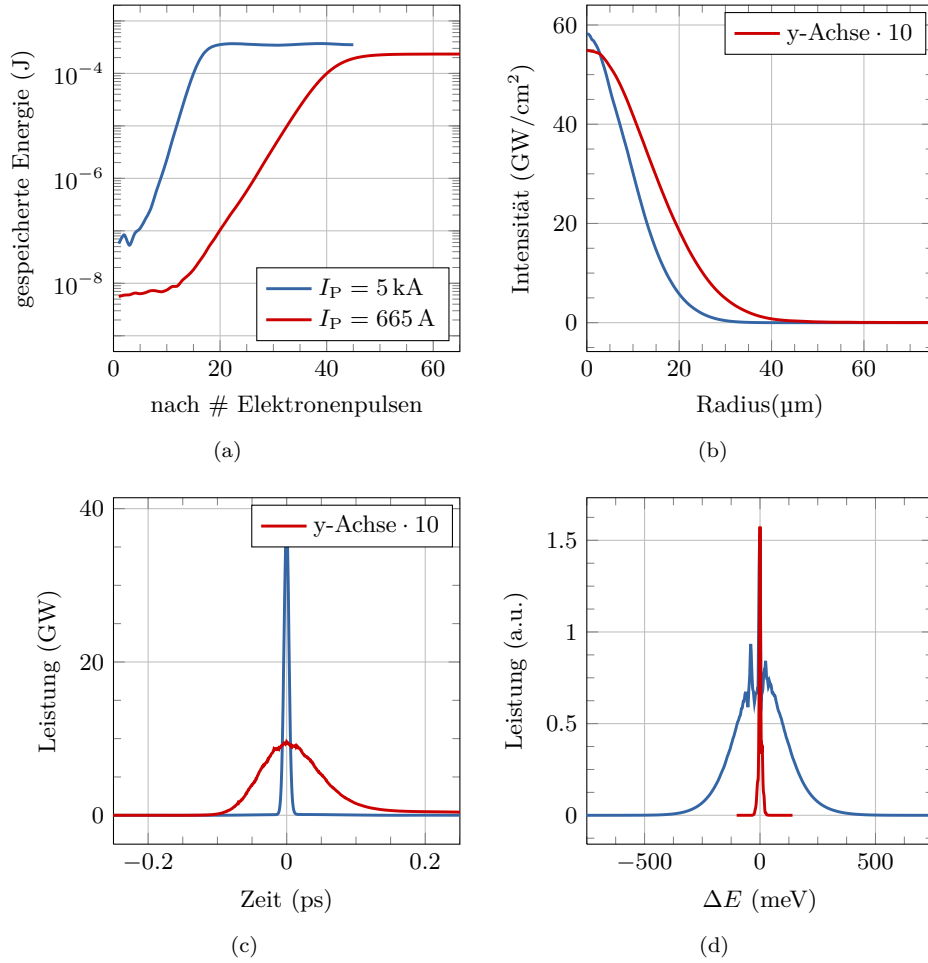


Abbildung 6.7.: Numerische Simulation eines XFELs Elektronenpaketen mit einer Ladung von 100 pC für zwei unterschiedlich stark komprimierte Elektronenpakete. (a) Gespeicherte Pulsenenergie im Resonator in Abhängigkeit von der Anzahl des Undulatordurchlaufs. (b) Intensität in Abhängigkeit vom radialen Abstand von der Undulatorachse. (c) Gespeicherte Pulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Zeit. (d) Gespeicherte Pulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Frequenz.

einer Ladung von $q = 100 \text{ pC}$ zu nutzen, um einen XFEL am European XFEL zu treiben. Diese Pulse haben höhere Kohärenzeigenschaften als SASE-Pulse und durch die um drei Größenordnungen geringere Bandbreite ist die Spitzenbrillanz höher als die der SASE-Pulse am European XFEL. Unter der Annahme der Nutzung eines Elektronenstrahls mit einer Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung von etwa $\sigma_{E_B} = 10 \text{ MeV}$ (Elektronenpaket hat bereits ein SASE-Puls erzeugt) ist ein Elektronenstrahl mit einer Ladung von $q = 1 \text{ nC}$ geeignet. Dies eröffnet die Möglichkeit am European XFEL zwei RÖNTGEN-Lichtpulse mit einem Elektronenpaket zu erzeugen, wobei zum Betrieb eines XFELs ein Pulszug notwendig ist von denen die ersten 500 Pakete genutzt werden, um den XFEL in Sättigung zu bringen. Die Eigenschaften dieser Pulse weisen eine geringere Kohärenz auf als die Lichtpulse, erzeugt mit Elektronenpulsen geringer Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung. Sie haben

Tabelle 6.5.: Photonpulsparameter der numerischen Simulation mit einem 5 fs langen Elektronenpaket zur Erzeugung eines SASE Lichtpuls und einem weniger stark komprimierten 60 fs langen Elektronenpaket.

Spitzenstrom I_P	kA	5.000	0.665
Gespeicherte Photonenenergie E_{Phot}	μJ	352.0	234.0
Wellenlänge λ_{Rad}	$\text{\AA}$	1.030	1.030
maximale Verstärkung pro Undulatordurchlauf G_{max}		1.279	0.479
FEL-Parameter ρ_{FEL}	10^{-4}	8.360	4.270
Photonpulslänge (FWHM) t_{Phot}	fs	8.400	99.40
Bandbreite $\Delta\lambda$	10^{-16} m	22.40	0.608
Relative Bandbreite $\Delta\lambda/\lambda$	10^{-6}	21.80	0.590
Zeit-Bandbreiten Produkt TBP		0.561	0.578
Kohärenzzeit τ_{Koh}	fs	5.600	105.0
Kohärenzradius r_{Koh}	μm	12.99	12.97
Spitzenbrillanz des ausgekoppelten Lichtpuls PB	10^{34} B^1	1.020	5.860
Strahltaille (Undulatormitte) ω_0	μm	14.00	14.00
Strahldurchmesser (Kristall) ω_{Krist}	μm	37.80	37.80

¹ Photonen/s/mm²/mrad²/0.1 % Bandbreite

aber eine wesentlich höhere longitudinale Kohärenz verglichen mit SASE-Pulsen.

6.3. Unterschiedliche Wellenlängen

Mit einem XFELo lassen sich, je nachdem welche Kristallorientierung genutzt wird, unterschiedliche Wellenlängen generieren und verstärken. Exemplarisch sind unterschiedliche numerische Simulationen mit Wellenlängen zwischen 2.52 $\text{\AA}$ und 1.13 $\text{\AA}$ für die Diamantkristalle in Rückstreuung der Reflexe (220), (311), (331), (440) und (620) dargestellt. Für diese Simulationen beträgt die Undulatorlänge $L_U = 10 \text{ m}$. Die relative Energieabweichung ist für die dargestellten Berechnungen gleich und hat den Wert $\eta = 9.98 \cdot 10^{-5}$. Die Transferfunktion der BRAGG-Kristalle sind Kombinationen aus einem dicken und dünnen Kristallen (siehe Abb. 3.4). Die Dicke des Kristalls zur Auskopplung eines Teils der Strahlung ist in Tab. 3.1 für die unterschiedlichen Kristalle aufgelistet. Die Dicke variiert, damit die Transmission durch den Kristall für alle Simulationen etwa gleich ist. Die weiteren Elektronenparameter stimmen mit denen aus Tab. 6.1 überein, wobei die korrelierte Energieabweichung $\Delta E_{\text{Korr}} = 0$ ist.

Die Ergebnisse sind in Abb. 6.8 zusammengefasst. Zu längeren Wellenlängen nimmt die Verstärkung zu. Die unterschiedlichen Sättigungsenergien resultieren aus der relativen Energieabweichung des Elektronenstrahls bezüglich der Resonanzenergie. Das Maximum der Verstärkungskurve verschiebt sich mit der Wellenlänge. Die gespeicherte Energie eines XFELos hängt von der relativen Energieabweichung ab und ist wellenlängenabhängig (vgl. Abb. 6.3). Ferner sind die Pulse longitudinal und transversal für alle betrachteten Kristallorientierungen nahezu GAUSSförmig. Die Spektren weisen eine leichte Asymmetrie auf.

Bei der Umsetzung eines XFELos mit kürzerer Wellenlänge müssen die Kristalldicken zur

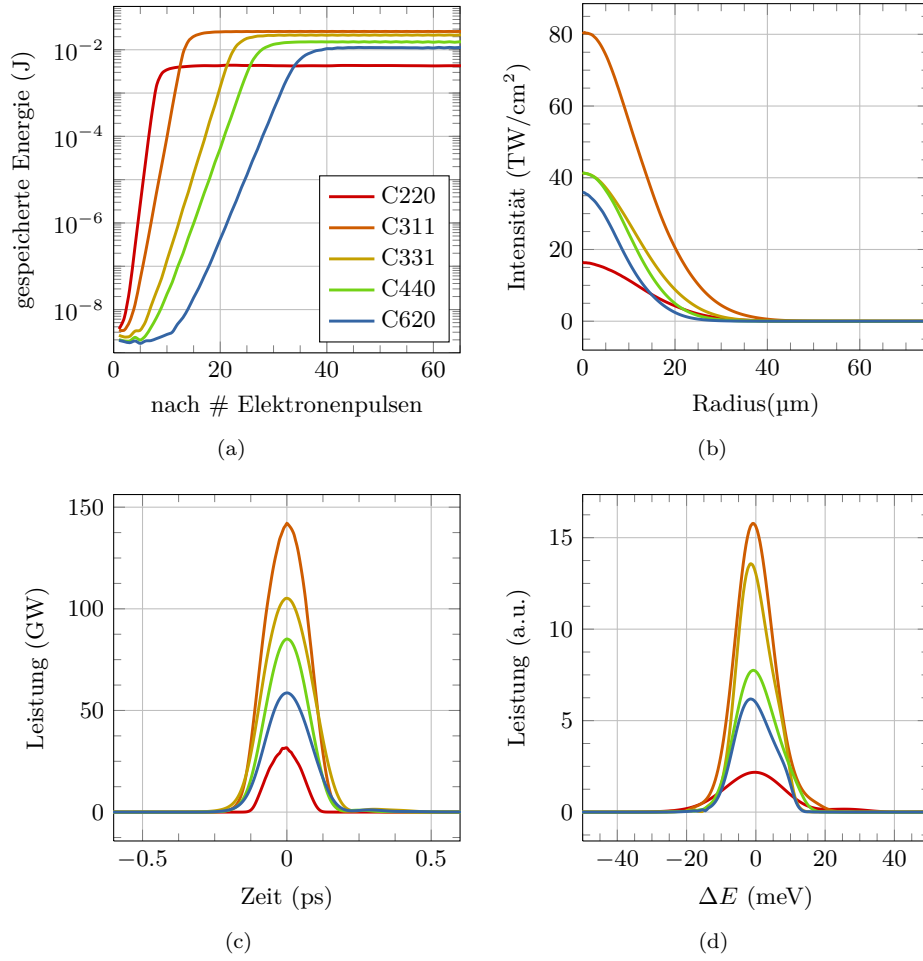


Abbildung 6.8.: Numerische Simulation eines XFELs mit einem 75 fs langen SASE-typischen Elektronenpaket für unterschiedliche Wellenlängen. (a) Gespeicherte Pulsenergie im Resonator in Abhängigkeit von der Anzahl der Undulatordurchläufe. (b) Intensität in Abhängigkeit von radialen Abstand von der Undulatorachse. (c) Gespeicherte Photonpulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Zeit. (d) Gespeicherte Photonpulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit von der Frequenz.

Auskopplung von Strahlung dünner werden, da die Eindringtiefen in den Kristall bei BRAGG-Reflexion geringer werden (siehe Abb 3.5). Wie in Kapitel 4 erläutert, nimmt die Wärmeleitung in Diamant mit einer geringen Dicke ab, da ballistische Effekte die Wärmeleitung beeinflussen. Außerdem steigt bei gleicher Absorption die Energiedichte, was zu einer höheren Temperatur führt. Des Weiteren nimmt die Reflektivität zu kleineren Photonenenergien ab (SHVYD'KO *et al.*, 2011). Die geringere Wärmeleitung erschwert das Abführen der eingebrachten Energie. Das Niveau der Sättigungsenergie ist in den hier vorgestellten Ergebnissen nicht optimiert worden, um die Erwärmung möglichst gering zu halten. Ein XFEL mit einer höheren Photonenenergie ist möglich (LINDBERG *et al.*, 2011), wurde aber bisher nicht mit Parametern des European XFEL berechnet.

6.4. Einflüsse auf die Verstärkung bei einem XFEL

Nachfolgend wird der Einfluss der wichtigsten Parameter des Elektronenpakets oder des Oszillators auf die Verstärkung untersucht, wie einer linearen Korrelation der Elektronenenergie, einer unkorrelierten Energieabweichung der Elektronen, einer Puls-zu-Puls Energieabweichung der Elektronenpakete, einer Winkelfehlstellung eines BRAGG-Kristalls, ein Versatz des Elektronenstrahls zur Undulatorachse, ein Winkel des Elektronenstrahl zur Undulatorachse und ein Oberflächenfehler des ersten fokussierenden Spiegels.

6.4.1. Lineare longitudinale Energiekorrelation

Die Untersuchung des Einflusses einer longitudinalen Energiekorrelation auf die Verstärkung ist mit dem Programm GINGER berechnet worden. GINGER addiert einen linearen Energiegradienten mit der Amplitude des Parameters `gamchirp` auf die Elektronenenergie, sodass der vordere Teil des Elektronenpakets (halbe Länge des Stromprofils `t_body`) eine um `gamchirp/2` höhere und der hintere Teil eine um `gamchirp/2` niedrigere Energie hat.

In der Abb. 6.9 (links) ist die Abhängigkeit der normierten Verstärkung in Abhängigkeit von einer linearen longitudinalen korrelierten Energieabweichung von der Sollenergie für einen $L_U = 15$ m langen Undulator und Elektronenparametern aus Tab. 6.1 dargestellt. Die Normierung erfolgt auf die Verstärkung ohne korrelierte Energieabweichung. Der in der Abbildung dargestellte Wert an der Abszisse ist die korrelierte Energieabweichung der Elektronen zwischen dem vorderen Teil des Elektronenpulses und hinteren Teil des Elektronenpulses.

Die Änderung der Verstärkung weist eine Schulter auf. Bis zu einer linear korrelierten Energieabweichung von $\Delta E_{\text{Korr}} = 25$ MeV nimmt die Verstärkung nur wenig ab (auf 95 %). Für eine höhere korrelierte Energieabweichung ist die Abnahme der Verstärkung nahezu linear mit einer Steigung von $0.35 \frac{\%}{\text{MeV}}$. Diese Schulter resultiert aus der Breite der Verstärkungskurve (vgl. Abb. 2.7 (links)). Für die genutzten Parameter ist die Breite $\Delta\eta$ der Verstärkungskurve

$$\Delta\eta_{\text{numerisch}} = 1.76 \cdot 10^{-3} \qquad \Delta\eta_{\text{analytisch}} = 1.5 - 2.1 \cdot 10^{-3},$$

je nachdem ob die Effekte für Beugung, Energieabweichung und Divergenz (vgl. XIE, 2000) berücksichtigt werden. Diese Werte stimmen mit denen aus der Simulation gut überein.

Beim European XFEL wird eine longitudinale Energiekorrelation in der Höhe von $\Delta E_{\text{Korr}} = 10$ MeV für ein $q = 1$ nC Ladungspaket und etwa $\Delta E_{\text{Korr}} = 20$ MeV für ein komprimiertes $q = 100$ pC Ladungspaket erwartet. Anhand der oben gezeigten Abhängigkeit ist dieser Parameter unkritisch (ZAGOROTNOV, 2011).

6.4.2. Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung

In der Abb. 6.9 (rechts) ist die normierte Verstärkung in Abhängigkeit von einer Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung ohne longitudinale Korrelation dargestellt. Die Berechnung ist mit dem Programm GINGER durchgeführt worden, wobei der Parameter `dgamma` variiert wird. Die Energieverteilung ist GAUSSförmig. Die Normierung erfolgt auf die Verstärkung mit $\sigma_{E_B} = 0$. Die Verstärkung nimmt nahezu linear mit zunehmender Standardabweichung σ_{E_B} ab (Steigung $\sim 1.5 \frac{\%}{\text{MeV}}$). Für eine Standardabweichung der Energieverteilung der Elektro-

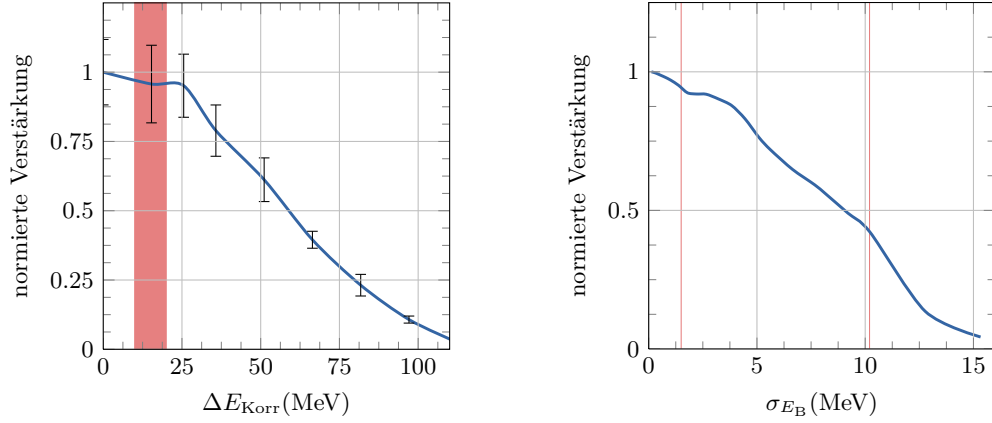


Abbildung 6.9.: Links: Normierte Verstärkung des Lichtfeldes pro Undulatordurchlauf in Abhängigkeit einer linearen longitudinalen Korrelation der Elektronenenergie von der Sollenergie zwischen vorderem und hinterem Teil im Elektronen. Rechts: Normierte Verstärkung des Lichtfeldes pro Undulatordurchlauf in Abhängigkeit von der Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung. Die roten senkrechten Linien zeigen die Parameter des European XFELs.

nen von der Sollenergie von etwa $\sigma_{E_B} = 15$ MeV ist die Verstärkung des Lichtfeldes nahe Null $G_{\text{max}} \approx 0$. Wird eine Standardabweichung der Energieverteilung von $\sigma_{E_B} \approx 10$ MeV angenommen, wie es für einen Elektronenstrahl, der einen SASE-Puls generiert hat, der Fall wäre, nimmt die Verstärkung auf etwa 40 % ab.

Die Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung ist hauptsächlich durch den Injektor, der Synchrotronstrahlung (z.B. Coherent Synchrotron Radiation (CSR)) gegeben. Elektromagnetische Felder werden durch das Elektronpaket selbst oder vorangegangene Elektronenpakete und dem endlich leitenden Strahlrohr und der Apertur des Strahlrohrs erzeugt. Diese wirken auf das Elektronpaket zurück und können auch die Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung beeinflussen.

6.4.3. Puls-zu-Puls Energiefehler der Elektronenpakete

In diesem Abschnitt wird die Abhängigkeit der Verstärkung von der Puls-zu-Puls Abweichung der mittleren Elektronenenergie untersucht. Eine Ursache eines Energiefehlers ist die Amplitudenstabilität der Hochfrequenz mit der die Beschleunigungsstrukturen betrieben werden, was zu einem Energiefehler im Bereich von $\Delta E/E_B = 0.1 - 0.01\%$ führt (SCHLARB, 2012). Im Gegensatz zu den vorhergegangenen Simulationen wurde für diese numerische Untersuchung das Programm GENESIS zusammen mit OPC genutzt (KARSSENBERG *et al.*, 2008; KARSSENBERG *et al.*, 2006). GENESIS wurde bei dieser Berechnung der Verstärkung im zeitunabhängigen Modus genutzt, bei dem ein unendlich langer Elektronenpuls angenommen wird. Daher ist es nicht nötig einen spektralen Filter in die Berechnung zu implementieren, da das Lichtfeld von GENESIS monochromatisch berechnet wird. Es wurde ein Dämpfungsfaktor < 1 , der die Absorption des BRAGG-Kristalls berücksichtigt, eingefügt. In diesen Berechnungen ist die Verstärkung vom ersten Umlauf an maximal und wird nur durch den eingeführten Dämpfungsfaktor reduziert, da Effekte, die aus dem Filtern des umlaufenden Lichtpulses aufgrund der infinitesimalen Band-

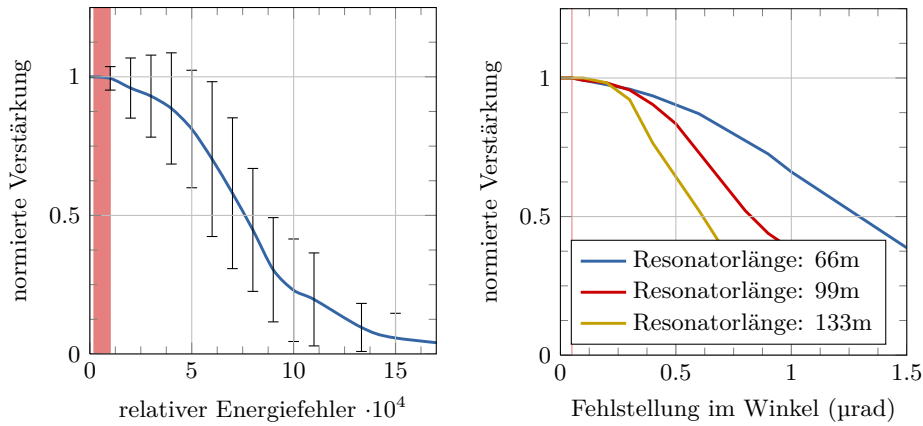


Abbildung 6.10.: Links: Normierte Verstärkung pro Undulatordurchgang in Abhängigkeit einer Puls-zu-Puls Energieabweichung der Elektronenenergie von der Sollenergie. Das rote Band zeigt die im European XFEL zu erwartenden Elektronenenergiefehler an. Rechts: Abhängigkeit der Verstärkung in Abhängigkeit des Aufstellungsfehlers im Winkel des ersten Kristalls. Die rote Linie zeigt eine Grenze der Aufstellungsgenauigkeit an (STOUPIN *et al.*, 2010a).

breite des Photonpulses herrühren, nicht auftreten. Für die Simulation wurde eine Standardabweichung der mittleren Elektronenenergie gewählt und für jeden Undulatordurchlauf wurde die mittlere Elektronenenergie stochastisch im Rahmen der angenommenen Standardabweichung berechnet. Diese Simulation wurde für jede Standardabweichung 100 mal wiederholt.

In Abb. 6.10 (links) ist der Mittelwert und die Standardabweichung gegen die relative Standardabweichung der Energie aufgetragen (ZEMELLA *et al.*, 2011). Zu erkennen ist das Anwachsen der Standardabweichung und die Abnahme der Verstärkung mit der Zunahme der Puls-zu-Puls Energiefluktuationen. Für eine Standardabweichung $> 10^{-4}$ nimmt der Fehler wieder ab.

Ein Vergleich mit den Berechnungen aus Abschnitt 6.4.1 (siehe Abb. 6.9 (rechts)) zeigt, dass die Abnahme der Verstärkung mit der relativen Energieabweichung der Puls-zu-Puls Energieabweichung in derselben Größenordnung liegt wie die Abnahme der Verstärkung mit der Zunahme der unkorrelierten Energieabweichung. Aus den Berechnungen folgt, dass der im European XFEL zu erwartende Energiefehler der Elektronenenergie keinen Einfluss auf die Verstärkung eines XFELs hat.

6.4.4. Winkelfehlstellung des ersten Kristalls

Mit GENESIS und OPC ist es möglich, den Einfluss auf die Verstärkung eines XFELs in Hinblick auf eine Winkelfehlstellung eines BRAGG-Kristalls im Resonator zu untersuchen. Der mit OPC berechnete Oszillator besteht aus zwei Linsen und zwei Spiegeln (2C2M-Konfiguration, siehe S. 45). An der Position des ersten BRAGG-Kristalls wird die Richtung des Lichtfeldes um einen Winkel geändert (`tilt xr`). Die Parameter der Resonatoren sind in Tab. 5.3 aufgelistet.

In Abbildung 6.10 (rechts) ist die normierte Verstärkung in Abhängigkeit von der Fehlstellung des Spiegels im Winkel der horizontalen Achse für drei verschieden lange Resonatoren dargestellt. Für längere Resonatoren nimmt die Verstärkung schneller ab. Die in Abschnitt 5.1.3 errechneten Winkeltoleranzen, wobei eine Ablage von 10% der Strahlgröße angenommen wird,

erscheinen in Hinblick auf die Untersuchung mit GENESIS und OPC zu hoch. Bis zu einem Winkel von $\Delta\theta_x = 100 \text{ nrad}$ ist die Verstärkung für alle berechneten Resonatorlängen nahezu konstant. Für einen 133 m langen Resonator ergibt sich für die analytische Betrachtung eine Toleranz von $\Delta\theta_x = 45 \text{ nrad}$, welche sich nicht mit den Resultaten aus dieser Betrachtung deckt. Andererseits liegt die Abnahme der Verstärkung, hervorgerufen durch eine 10 %-ige Ablage oder Winkel (siehe Abb. 6.11), in derselben Größenordnung.

Die in Abbildung 6.10 (rechts) eingetragene rote Linie bezeichnet ein Limit mit denen BRAGG-Kristalle im Winkel aufgestellt und positioniert werden können (STOUPIN *et al.*, 2010a).

Eine weiterführende Untersuchung des Einflusses der Fehlstellungen der optischen Komponenten ist auch im Hinblick auf ein Zusammenwirken mehrerer Fehler (alle optischen Komponenten haben eine Fehlstellung, Wellenfrontstörungen und nicht konstante Länge des Resonators) erforderlich.

6.4.5. Elektronenstrahl mit transversalem Versatz zur Undulatorachse

In diesem Abschnitt wird die Abhängigkeit der Verstärkung auf einen transversalen Versatz des Elektronenstrahls mit dem FEL Simulationsprogramm GINGER, durch Variation der Parameter `xoff` und `yoff` untersucht. Die Elektronenstrahlparameter und die Parameter des Resonators sind in Tab. 6.1 aufgelistet. Aus zwanzig durchgeführten Berechnungen ist der Mittelwert und die Standardabweichung der normierten Verstärkung in Abb. 6.11 (links) in Abhängigkeit vom horizontalen bzw. vertikalen Strahlversatz abgebildet. Die Normierung erfolgt auf die Verstärkung für ein Elektronenpaket ohne Strahlversatz zur Undulatorachse. Die Abnahme der Verstärkung nimmt mit größeren Ablagen zu. Diese Abhängigkeit stimmt mit dem Bild überein, dass die Wechselwirkung zwischen Lichtfeld und Elektronpaket entscheidend ist und mit zunehmendem Strahlversatz abnimmt (siehe Kapitel 2). Die Abhängigkeit in x- bzw. y-Richtung ist nahezu gleich. Dies ist für einen symmetrischen Elektronenstrahl zu erwarten.

Abweichungen der Elektronen vom Sollorbit entstehen durch Aufstellungstoleranzen oder Feldfehler der magnetischen Komponenten der Strahlführung, sei es durch Fertigungstoleranzen oder durch das Rauschen des Netzgerätes. Durch eine Regelschleife für die Strahlposition vor und entlang des Undulators wird die Strahllage bis eine Abweichung von $1 \mu\text{m}$ dem Sollorbit entsprechen (KEIL *et al.*, 2007). Eine derartige Ablage hat keinen Einfluss auf die Verstärkung eines XFELs.

6.4.6. Elektronenstrahl mit Winkel zur Undulatorachse

Die Parameter `xprime`, `yprime` des Programms GINGER ändern den Winkel zwischen dem Elektronenpaket und der Undulatorachse. Die Elektronen- und Resonatorparameter sind in Tab. 6.1 zusammengestellt. Es wurden zwanzig Berechnungen mit unterschiedlichen Parametern für das statistische Rauschen gemittelt und die Standardabweichung berechnet.

In Abb. 6.11 (rechts) ist die normierte Verstärkung in Abhängigkeit vom Winkel zwischen Elektronenstrahl und Undulatorachse gezeigt. Die Normierung erfolgt auf die Verstärkung für einen Elektronenstrahl mit dem Winkel Null zur Undulatorachse. Da der Überlapp zwischen dem Lichtfeld und dem Elektronenpaket mit größerem Winkel kleiner wird, nimmt die Verstärkung mit zunehmenden Winkel ab.

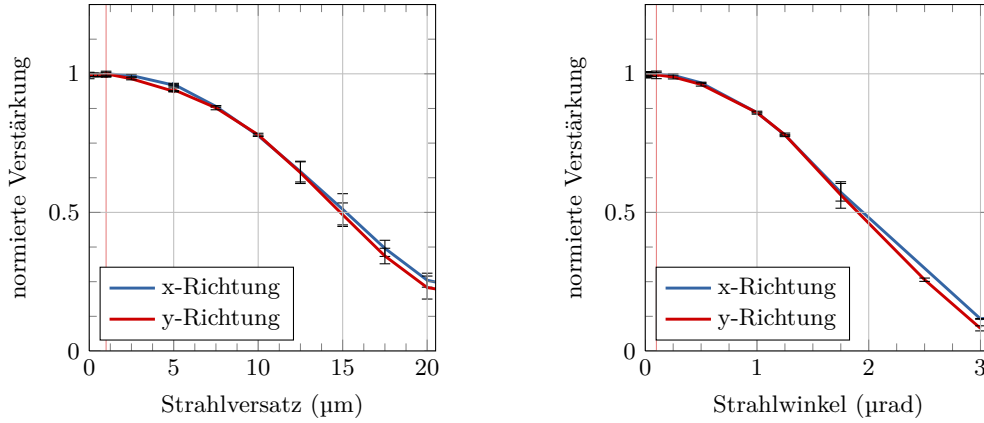


Abbildung 6.11.: Links: Normierte Verstärkung pro Undulatordurchlauf in Abhängigkeit von der Strahlversatz des Elektronenstrahls. Rechts: Abhängigkeit der Verstärkung von dem Strahlwinkel des Elektronenstrahls. Als rote Linie ist die erwartbare Ablage und Winkel dargestellt (KEIL *et al.*, 2007).

Durch eine Regelschaltung auf den Orbit des Elektronenpakets wird die Strahlage auf bis zu 1 µm genau dem Sollorbit entsprechen. Wird vor und hinter dem Undulator ein Strahllagemonitor eingesetzt, ist der maximale Winkel des Elektronenstrahls zur Undulatorachse (vorausgesetzt Sollorbit und Undulatorachse fallen zusammen) einen Winkel von etwa $\theta = 100$ nrad. Ein Winkel dieser Größenordnung hat in diesen Berechnungen keinen Einfluss.

6.4.7. Oberflächenfehler am fokussierenden Spiegel im streifenden Einfall

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der numerischen Untersuchung mit GENESIS (zeit-unabhängiger Modus) und OPC zu dem Einfluss von Oberflächenfehlern am fokussierenden Spiegel im streifenden Einfall diskutiert (ZEMELLA *et al.*, 2011). Eine raue Oberfläche des Spiegels beeinflusst die Wellenfront, in dem die Wellenfront an jedem Punkt des Spiegels einen individuellen Phasenvorschub abweichend vom Phasenvorschub der idealen Oberfläche des optischen Elements erfährt. Zunächst wird ein zweidimensionales Gitter entsprechend der Anzahl der Gitterpunkte des transversalen GENESIS-Gitter erzeugt. Für jedes Gitterelement wird eine zufällige, von der idealen Oberfläche abweichende, Distanz bestimmt, die zu dem Nachbarpunkten eine gewählte Grenze nicht überschreiten darf, sodass ein Höhenprofil berechnet wird, welches den Unterschied zur idealen Oberfläche beschreibt. In Abb. 6.12 (links) ist exemplarisch ein solches Höhenprofil für eine Abweichung von 2 nm (rms) dargestellt. Aus diesem Höhenprofil lässt sich nun aus dem Weglängenunterschied der Propagation der Phasenfehler jedes Gitterpunktes ermitteln, den der Strahl des jeweiligen Gitterpunktes aufgrund der Unebenheiten der Oberfläche erfährt (vgl. KEWISH *et al.*, 2007)

$$W(\Delta h) = -2\Delta h \sin(\theta), \quad (6.10)$$

wobei Δh die Abweichung der rauen zur idealen Oberfläche und θ der Einfallswinkel zur Oberfläche ist. θ wird in dieser Berechnung auf 2 mrad gesetzt, entsprechend der Einfallswinkel für Optiken im streifenden Einfall.

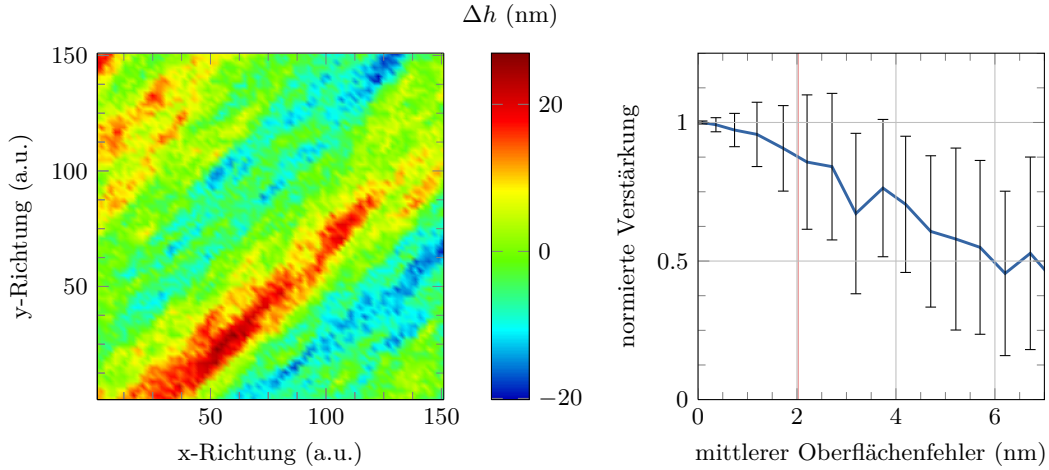


Abbildung 6.12.: Links: Höhenprofil der Abweichungen für ein GENESIS-Gitter mit 151×151 Punkten für eine rms-Abweichung von 2 nm. Rechts: Normierte Verstärkung pro Undulatordurchgang in Abhängigkeit eines mittleren Oberflächenfehlers des ersten fokussierenden Spiegels im Resonator.

Eine Matrix aus den Gitterpunkten mit den Werten aus Gl. 6.10 kann mit OPC geladen und auf das Lichtfeld angewendet werden. Die Matrizen mit unterschiedlichen Grenzen für den Punkt-zu-Punkt Abstand der benachbarten Gitterpunkte werden nach dem mittleren Oberflächenfehler sortiert. Die Ergebnisse für die Abhängigkeit der Wellenfrontstörungen auf die Verstärkung sind in Abb. 6.12 (rechts) aufgetragen. Da sich bei der Generierung der Matrizen unterschiedliche mittlere Oberflächenfehler ergeben, werden die numerischen Simulationen, die in einem gewählten Intervall (hier ± 0.5 nm) liegen, zusammengefasst und der Mittelwert und die Standardabweichung gebildet.

Wie zu erkennen ist, nimmt die Verstärkung mit zunehmenden Oberflächenfehler ab, da die Fokussierbarkeit des Lichtfelds abnimmt und somit der Überlapp zwischen Elektronenpaket und Lichtfeld geringer wird. Außerdem ist zu erkennen, dass die Variation der Verstärkung für größere Oberflächenfehler des fokussierenden Spiegels zunehmen.

Die Herstellungstoleranzen der Oberflächenfehler für 800 mm lange Optiken im streifenden Einfall liegen derzeit bei 2 nm (rms) (eingezeichnet in Abb. 6.12 (rechts) als rote Linie). Ein derartiger Oberflächenfehler verursacht nach dieser Berechnung eine Abnahme der Verstärkung von über 10 %, wobei der Fehler der Berechnung mit ± 25 % größer als die Abnahme selbst ist. Aufgrund der Berechnung des Oberflächenfehlers als zufälliges zweidimensionales Gitter sollten diese Berechnungen mit realitätsnäheren Oberflächenunebenheiten wiederholt werden.

Die numerischen Berechnungen mit GINGER und GENESIS zeigen, dass mit einem kurzen Undulator im Vergleich zu den SASE-Undulatoren des European XFELs und einem optischen Resonator, bestehend aus BRAGG-beugenden Diamantkristallen, ein nahezu vollständig kohärenter Lichtpuls erzeugt werden kann, dessen Spitzenbrillanz oberhalb der SASE-Pulse liegt. Die Erwärmung der Kristalle und der daraus folgenden Ausdehnung der Kristalle ändert die Wellenlänge der BRAGG-Beugung. Somit sind die Sättigungsenergie und die Absorption der Kristalle die kritischsten Parameter für den Betrieb eines XFELs. Die Sättigungsenergie hängt stark

von der Elektronenenergie (ZEMELLA *et al.*, 2011) und der relativen Energieabweichung der Elektronen von der Resonanzenergie η ab. Für $\eta \approx 0$ werden kleinere Sättigungsenergien erreicht, da sich im Phasenraum (z, η) für kleinere η das Verhältnis zwischen den Elektronen, die Energie an das Lichtfeld abgeben und den, die Energie vom Lichtfeld aufnehmen, näher bei 1 liegt als für größere η . Dies stimmt mit dem Bild des MADEY-Theorems überein.

Aufgrund der Speicherung des Photonpulses in dem Resonator ist es möglich, mit verringerter Verstärkung Sättigung innerhalb eines Pulszugs zu erreichen, obwohl das Elektronenpaket durch die vorherige Abstrahlung eines SASE-Lichtpulses eine erhöhte Energieverteilung der Elektronen σ_{E_B} aufweist. Dieser Umstand ermöglicht es, einen zweiten vollständig kohärenten Lichtpuls zusätzlich zu einem SASE- oder „Self-Seeded“-Puls zu erzeugen.

Starke Einflüsse auf die Verstärkung haben die Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung σ_{E_B} und Oberflächenfehler der Spiegel im streifenden Einfall, wobei der Einfluss der Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung deutlich wird, bei der Betrachtung eines vorher von einem SASE-Puls erzeugten Elektronenpakets. Die anderen untersuchten Parameter haben im Rahmen dessen, was derzeit erreichbar ist, z.B. der Strahlstabilität oder der Aufstellungstoleranzen der Kristalle, keinen deutlichen Einfluss. Bei den Aufstellungstoleranzen sollten weitere Untersuchungen gemacht werden, die mehrere Fehler zusammen berücksichtigen, um kumulative Effekte auszuschließen. Außerdem konnte die Erwärmung der Kristalle in die Berechnung der Lichtpulse mit einbezogen werden. Eine Berechnung eines XFELs mit gleichzeitiger Berechnung der Änderung der Wellenlänge der BRAGG-Beugung aufgrund von Absorption erscheint sinnvoll.

7. Numerische Simulation der Wärmelast auf Kristallen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der numerischen Simulationen zur Temperaturentwicklung der Kristalle nach Absorption eines Pulszugs von Röntgenlichtpulsen diskutiert. Zunächst werden einige grundsätzliche Eigenschaften der Röntgenlichtpulse, die simuliert worden sind, erläutert. In Anhang D.1 sind die temperaturabhängigen Eigenschaften für Diamant, die für die BRAGG-Reflexion relevant sind, dargestellt. Es werden die thermischen Simulationen für Diamantkristalle bei $T_0 = 50$ K für zwei unterschiedliche Dicken, wie sie bei einem XFELo zum Einsatz kommen könnten, vorgestellt.

Die absorbierte Energie der Röntgenlichtpulse in den Kristallen führt zur Ausdehnung des Kristalls. Die thermische Ausdehnung ändert die Gitterkonstante. Die Gitterkonstante, die Orientierung der Kristallebenen und der Einfallswinkel des Lichts bezüglich der Kristallebenen definieren die Photonenenergie des reflektierten Lichts (siehe Gl. 3.1). Ist die relative thermische Ausdehnung des Kristalls größer als die relative DARWIN-Breite der BRAGG-Reflexion, liegt die reflektierte Photonenenergie außerhalb der Reflexionskurve des Kristalls mit der Ausgangstemperatur T_0 (siehe Gl. 3.6). Die Erwärmung des Kristalls führt zu einer Deformation des Gitters, welches die Reflexionseigenschaften des Kristalls beeinflusst. Auf die Beeinflussung der Reflexionseigenschaften aufgrund der Deformation des Kristallgitters wird in dieser Arbeit nicht weiter eingegangen.

Ein Strahlungspuls eines XFELos besteht aus zwei Strahlungskomponenten. Zum einen der inkohärenten Undulatorstrahlung, einem Strahlungspuls, der erzeugt wird, wenn ein Elektronenpaket durch einen Undulator geleitet wird (siehe Abschnitt 2.5). Zum anderen besteht der Strahlungspuls aus einem im Undulator verstärkten und durch die BRAGG-Kristalle monochromatisierten kohärenten Lichtpuls (XFELo-Puls). Die inkohärente Undulatorstrahlung und die kohärente FEL-Strahlung haben unterschiedliche Öffnungswinkel. Der Öffnungswinkel der Undulatorstrahlung ist mit $\theta_{\angle, \text{Und}} = K/(\beta_{\text{rel}}\gamma_{\text{rel}})$ größer als der Öffnungswinkel der beugungsbegrenzten FEL-Strahlung, der sich mit

$$\theta_{\angle, \text{XFELo}} = \arctan \left(\frac{\omega_0(\lambda)}{z_{\text{R}}(\lambda)} \right) \quad (7.1)$$

berechnet lässt (DOHLUS *et al.*, 2008, S.19,181), wobei $\omega_0(\lambda)$ die Strahltaile und $z_{\text{R}}(\lambda)$ die RAYLEIGH-Länge ist (Im Folgenden wird $\lambda_{\text{Rad}} = 1$ Å angenommen). Für eine RAYLEIGH-Länge von $z_{\text{R}} = 6.54$ m beträgt der Öffnungswinkel etwa $\theta_{\angle, \text{XFELo}} \approx 2.24$ µrad. In diesem Fall ist der Strahlfleck der kohärenten FEL-Strahlung 40 mal kleiner als der Strahlfleck der inkohärenten Undulatorstrahlung. Mit einer geeigneten Blende ist es möglich, einen Großteil der inkohärenten Undulatorstrahlung vom Kristall und vom Spiegel im streifenden Einfall abzuschirmen (siehe Abb. 7.1 (links)).

Der hochenergetische Anteil der Undulatorstrahlung wird von dem fokussierenden Spiegel im streifenden Einfall nicht reflektiert, da der kritische Winkel der Totalreflexion mit zunehmender

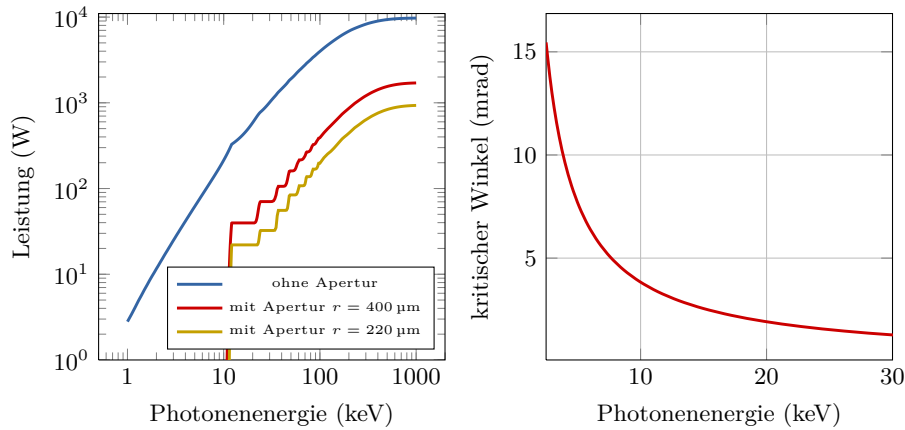


Abbildung 7.1.: Links: Integrierte abgestrahlte spontane Undulatorstrahlung in Abhängigkeit von der Photonenenergie für einen 15 m langen Undulator mit Parametern des zuvor vorgestellten XFELs ohne Apertur und mit zwei unterschiedlichen Radien einer runden Apertur. Spektrum ist berechnet mit XOP XURGENT. Rechts: Kritischer Winkel in Abhängigkeit von der Photonenenergie für Diamant.

Photonenenergie abnimmt (siehe Abb. 7.1(rechts)).

Für den Fall, dass die Länge des Elektronenpulses etwa

$$t_{\text{Phot}} \approx 0.44/f_{\text{BRAGG}}$$

entspricht, dringt die FEL-Strahlung entsprechend der BRAGG-Extinktionslänge in den Kristall ein, die spontane Undulatorstrahlung hingegen dringt entsprechend der Photoabsorptionslänge in den Kristall ein. Für Diamant sind diese beiden Eindringtiefen (siehe Abb. 3.5)

$$\begin{aligned} l_{\text{Ext}}(12 \text{ keV}) &= 20.464 \mu\text{m} \\ l_{\text{Abs}}(12 \text{ keV}) &= 2.9822 \text{ mm.} \end{aligned} \tag{7.2}$$

Sollte der Elektronenpuls kürzer sein, so ist die Bandbreite des erzeugten Strahlungspuls größer als die der DARWIN-Breite des BRAGG-Kristalls. Der Frequenzanteil der FEL-Strahlung außerhalb der Reflexionskurve des Kristalls dringt entsprechend der Photoabsorption in den Kristall ein (siehe Abb. 3.5).

Wie oben erwähnt, erwärmt der absorbierte Anteil des Lichts den Kristall. Diamantkristalle haben eine Reflektivität von über 99 % (SHVYD'KO *et al.*, 2010, 2011) im Gegensatz zu Siliziumkristallen, die eine Spitzenreflektivität von 93 % haben (vgl. SHVYD'KO, 2004, S. 342 ff). Die hohe Reflektivität der Kristalle ist notwendig, damit die absorbierte Energie im Kristall klein ist.

Wie in Kap. 6 bzw. Anhang C.1 gezeigt, liegt die Sättigungsenergie eines XFELs zwischen $E_{\text{Sat}} = 40 \mu\text{J}$ bei einer Strahlgröße von $\sigma_R = 92 \mu\text{m}$ am Spiegel für einen ERL typischen Elektronenpuls und etwa $E_{\text{Sat}} = 50 \text{ mJ}$ und einer Strahlgröße von $\sigma_R = 40 \mu\text{m}$ am Spiegel für einen auf maximale Ausgangsleistung optimierten XFEL mit einem SASE-typischen Elektronenpuls des European XFELs. Im Fall eines XFELs mit minimierter Ausgangsleistung liegt die Pul-

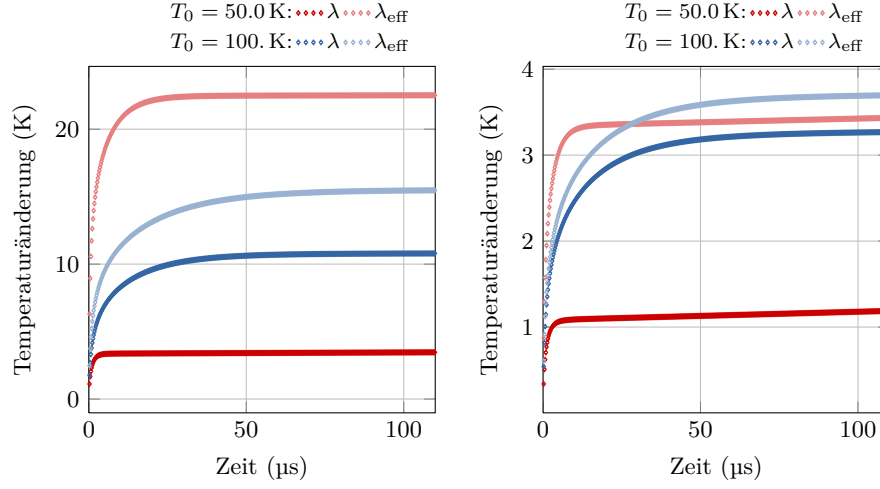


Abbildung 7.2.: Temperatur des Diamantkristalls für die eindimensionale radial-symmetrische Berechnung vor Absorption von $E_{\text{Abs}} = 2 \mu\text{J}$ des folgenden Pulses mit einem Pulsabstand von $t_{\text{Sep}} = 222 \text{ ns}$ und einer Strahlgröße von $\sigma_R = 39 \mu\text{m}$ für einen Links: $d_{\text{Krist}} = 42 \mu\text{m}$ bzw. Rechts: $d_{\text{Krist}} = 150 \mu\text{m}$ dicken Kristall

senergie der XFEL-Pulse zwischen $E_{\text{Sat}} \approx 120 \mu\text{J}$ und $E_{\text{Sat}} \approx 350 \mu\text{J}$ bei einem Strahlradius am Kristall von etwa $\sigma_R = 40 \mu\text{m}$.

Für die Untersuchung dieser Fragestellung wurde ein Programm entwickelt, welches die Temperaturentwicklung in einem Medium unter der Annahme, dass die Temperaturentwicklung zylindersymmetrisch ist, numerisch berechnet. Eine ausführliche Beschreibung des Programms ist in Kap. 4 zu finden.

In den nachfolgenden Abschnitten wird die Temperaturentwicklung in Diamantkristallen für unterschiedliche Kristalldicken und für die Fälle, nur eines XFEL-Pulses, nur spontane Undulatorstrahlung, spontane Undulatorstrahlung und kohärenter XFEL-Pulse und einen Pulszug aus 10 ns langen Pulsen, wie er beim Experiment zum Einsatz kommt, diskutiert.

7.1. Temperaturentwicklung in Diamantkristallen

In Abbildung 7.2 ist die Temperatur zum Zeitpunkt direkt vor Absorption des folgenden Pulses eines Diamantkristalls für einen 33 m langen Resonator (66 m Umlauflänge) für einen dünneren Kristall mit $z_{\text{innen}} = 42 \mu\text{m}$ und einen dickeren Kristall $z_{\text{innen}} = 150 \mu\text{m}$ gezeigt. Die Kristalldicke nimmt bei $r > r_{\text{innen}} = 2.5 \text{ mm}$ auf $z_{\text{außen}} = 0.5 \text{ mm}$ zu. Der Radius des simulierten Kristalls beträgt $r_{\text{außen}} = 5 \text{ mm}$. Die Kristalltemperatur zum Zeitpunkt $t < 0$ beträgt $T_0 = 50 \text{ K}$ bzw. $T_0 = 100 \text{ K}$. Die Berechnung erfolgt eindimensional radial-symmetrisch (Eine vergleichbare Version des 2D-Programms). Die Wärmeleitung ist nach dem FOURIERSchen Gesetz berechnet. Es wurden zwei unterschiedliche Fälle betrachtet. Zum einen wird der Literaturwert des Wärmeleitungskoeffizienten λ_C benutzt. Zum anderen ein korrigierter Wärmeleitungskoeffizient λ_{eff} , um die ballistischen Wärmeleitungseffekte zu berücksichtigen (siehe Gl. 4.8). Die absorbierte Pulsenergie beträgt $E_{\text{Abs}} = 2 \mu\text{J}$ mit einer Strahlgröße von $\sigma_R = 39 \mu\text{m}$. Die spontane Undulatorstrahlung wurde bei diesen Simulationen nicht berücksichtigt (ZEMELLA *et al.*, 2012). Es

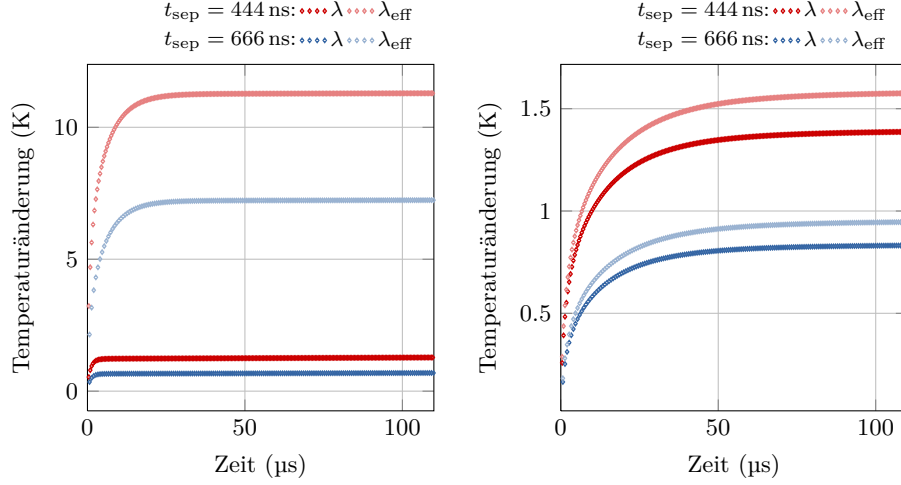


Abbildung 7.3.: Links: Temperatur des Diamantkristalls vor Absorption von $E_{\text{Abs}} = 2 \mu\text{J}$ des folgenden Pulses für eine Kristalltemperatur von $T_0(t < 0) = 50 \text{ K}$, einer Kristalldicke von $d_{\text{Krist}} = 42 \mu\text{m}$ und einer Strahlgröße von $\sigma_R = 78 \mu\text{m}$ für $t_{\text{Sep}} = 444 \text{ ns}$ bzw. $\sigma_R = 120 \mu\text{m}$ für $t_{\text{Sep}} = 666 \text{ ns}$. Rechts: Temperatur des Diamantkristalls vor Absorption von $E_{\text{Abs}} = 2 \mu\text{J}$ des folgenden Pulses für eine Kristalltemperatur von $T_0 = 100 \text{ K}$, einer Kristalldicke von $d_{\text{Krist}} = 150 \mu\text{m}$ und einer Strahlgröße von $\sigma_R = 78 \mu\text{m}$ für $t_{\text{Sep}} = 444 \text{ ns}$ bzw. $\sigma_R = 120 \mu\text{m}$ für $t_{\text{Sep}} = 666 \text{ ns}$. Beide Kristalltemperaturen wurden eindimensional radial-symmetrisch berechnet.

ist zu erkennen, dass bei dünneren Kristallen und tieferen Temperaturen die Effekte der ballistischen Wärmeleitung einen stärkeren Einfluss haben als für dickere Kristalle und höheren Temperaturen.

In Abbildung 7.3 ist die Kristalltemperatur zum Zeitpunkt direkt vor Absorption des folgenden Pulses für zwei unterschiedliche Pulswiederholraten für einen dünneren Kristall mit $z_{\text{innen}} = 42 \mu\text{m}$ und einen dickeren Kristall $z_{\text{innen}} = 150 \mu\text{m}$ dargestellt. Der Einfluss der unterschiedlichen Wärmeleitungskoeffizienten λ_C und λ_{Eff} ist deutlich kleiner, wenn die Zeitspanne t_{Sep} zwischen den Pulsen erhöht wird. Wie aus Abb. D.2 zu erkennen, ist die Änderung der BRAGG-Energie für ein $\Delta T = 20 \text{ K}$ etwa $\Delta E/E_H \approx 4 \cdot 10^{-7}$ (vgl. Gl. 3.6 und Abb. D.1d). Das entspricht etwa einem Fünftel der DARWIN-Breite eines Diamantkristalls bei $E_{\text{Phot}} \approx 12 \text{ keV}$ (vgl. Abb. 3.3).

In den eindimensionalen Berechnungen der Temperaturentwicklung wird die Annahme einer in der Tiefe konstanten Temperaturverteilung gemacht. Dies ist für den Fall von Photonenenergien weit entfernt von der vom BRAGG-Kristall reflektierten Photonenenergie (siehe Abb. 3.5) annähernd richtig, da die betrachteten Kristalldicken gegenüber der Photoabsorptionslänge klein sind. Im Fall eines XFELO-Pulses, dessen Photonenenergie BRAGG-Bedingung erfüllt, ist die Temperaturverteilung in der Tiefe nicht mehr konstant, sondern weist einen Temperaturgradienten auf (siehe Abb. 7.4b). In Tab. 7.1 sind die Parameter der Simulation aufgeführt. Abbildung 7.4a zeigt die zeitliche Temperaturentwicklung des Kristalls auf der optischen Achse $(r, z) = (0, 0)$ für eine Kristalldicke von $d_{\text{Krist}} = 42 \mu\text{m}$. Es zeigt sich für eine gepulste Anregung die charakteristische Sägezahnkurve. Die Temperatur nimmt nach der instantan absorbierten Energie sprunghaft zu, um dann bis zur Absorption des folgenden Pulses, abzunehmen. Der

Tabelle 7.1.: Parameter der thermischen Simulation.

Kristalltemperatur	T_0	K	50.00
Pulsabstand	t_{Sep}	ns	222.0
absorbierte Energie	E_{Abs}	μJ	2.000
Strahlradius	σ_{R}	μm	39.00
Kristallaußenradius	$r_{\text{au\ss en}}$	mm	5.000
Kristallinnenradius	r_{innen}	mm	2.500
Kristalldicke au\ss en	$z_{\text{au\ss en}}$	mm	0.500
Kristalldicke innen (dick)	z_{innen}	mm	0.150
Kristalldicke innen (dünn)	z_{innen}	mm	0.042

darauffolgende Temperaturanstieg ist etwas höher bis sich ein Gleichgewicht eingestellt hat. Der Temperaturanstieg $\Delta T = 30 \text{ K}$ zum Zeitpunkt $t = 10.9 \mu\text{s}$ (direkt vor Absorption des nachfolgenden Photonpulses) liegt etwa 7 K oberhalb der Temperatur aus der eindimensionalen Betrachtung (Abb. 7.2). Das liegt zum einen daran, dass der Temperaturanstieg nach Absorption des Photonpulses weitaus höher ist als bei der eindimensionalen Berechnung. Zum anderen wird bei der zweidimensionalen Berechnung die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Phononen auf die Schallgeschwindigkeit limitiert, welches in den eindimensionalen Berechnungen zu diesem Zeitpunkt noch nicht der Fall war. Die Abbildungen 7.4a-d zeigen die Temperaturverteilung des berechneten Kristallquerschnitts zum Zeitpunkt nach Absorption des ersten Pulses, nach Absorption des letzten Pulses und zum Ende der Simulation, hier nach $t = 50 \cdot t_{\text{Sep}}$. Der dickere Teil des Kristalls erwärmt sich in dem betrachteten Zeitintervall dabei fast gar nicht, und dient somit als ein Wärmereservoir mit einer sehr hohen Wärmeleitung.

Abbildung 7.5 zeigt die gleiche Berechnung für eine Kristalldicke von $d_{\text{Krit}} = 150 \mu\text{m}$. Zu erkennen ist der höhere Wärmefluss, sodass die Temperatur bei $(r, z) = (0, 0)$ deutlich schneller abnimmt. Es stellt sich ein Temperaturgleichgewicht für den Zeitpunkt vor Absorption des folgenden Puls mit einer Temperaturdifferenz zur Ausgangstemperatur T_0 von $\Delta T = 5 \text{ K}$ ein. Auch hier ist der Temperaturanstieg der zweidimensionalen Berechnung 2 K höher als die eindimensionale Berechnung. Im Anhang D sind weitere Berechnungen der Temperatur im Kristall nach Absorption eines Pulszugs für unterschiedliche Temperaturen T_0 gezeigt.

7.1.1. Einfluss des Undulatorstrahlungsuntergrundes

Der Einfluss der Undulatorstrahlung auf die Temperatur eines Diamantkristalls wird untersucht, indem das Spektrum in radialer Abhängigkeit für einen Elektronenpuls mit einer Ladung von $q = 1 \text{ nC}$ (siehe Abb. 2.4) genutzt wird, um die Temperaturverteilung im Kristall zu berechnen. Auf der optischen Achse ($r = 0 \text{ mm}$) hat dieses Spektrum ein Intensitätsmaximum bei etwa $E_{\text{Phot}} = 12 \text{ keV}$. Je größer der Abstand von der Undulatorachse ist desto kontinuierlicher wird das Spektrum der Strahlung dessen Intensität abnimmt. Der niederenergetischere Anteil der Undulatorstrahlung hat einen größeren Öffnungswinkel, sodass dieser Anteil durch eine geeignete Blende vom Kristall abgeschirmt werden kann. Dieser Anteil der Strahlung hat eine geringere Eindringtiefe als die erste Undulatorharmonische und wird daher stärker absorbiert

als der höherenergetische Anteil (siehe Abb. 3.5). Der höherenergetischere Anteil der Undulatorstrahlung hat eine größere Eindringtiefe und bei einem dünnen Kristall ($d_{\text{Krist}} \approx 42 \mu\text{m}$) wird entsprechend ein geringerer Anteil der Undulatorstrahlung absorbiert. Außerdem lässt sich der höherenergetischere Anteil der Strahlung durch eine geeignete Wahl des Einfallswinkel auf die fokussierende Optik im streifenden Einfall von dem BRAGG-Kristall abhalten, denn der kritische Winkel ist für höhere Photonenenergien kleiner (siehe Abb. 7.1(rechts)).

Wird nur die erste Harmonische der Undulatorstrahlung betrachtet, reduziert sich die Pulsenergie der spontanen Undulatorstrahlung E_{SUR} für ein Elektronenpaket mit einer Ladung von $q = 1 \text{ nC}$ von $E_{\text{SUR}} \approx 2 \text{ mJ}$ auf $E_{1\text{H}} \approx 50 \mu\text{J}$, denn in den höheren Harmonischen wird ein Großteil der Energie abgestrahlt. Die absorbierte Energie der spontanen Undulatorstrahlung pro Elektronenpaket beträgt somit $E_{\text{Abs}} \approx 1 \mu\text{J}$. Der Temperaturanstieg durch die spontane Undulatorstrahlung für einen Diamantkristall mit einer Temperatur von $T_0 = 50 \text{ K}$ beträgt dann $\Delta T \approx 2 \text{ K}$.

1 nC Elektronpaket In Abb. 7.6b ist die Temperaturverteilung der simulierten Undulatorstrahlung aus Abb. 2.4 dargestellt für einen Diamantkristall bei $T_0 = 50 \text{ K}$. Die Gleichgewichtstemperatur wird nach etwa $t = 10 \mu\text{s}$ erreicht und beträgt etwa $T = 53.5 \text{ K}$ (siehe Abb. 7.6a). Abbildung 7.6c,d zeigen die Temperaturverteilung im Kristall nach Absorption des letzten Pulses und vor Absorption des darauf folgenden Pulses.

Der Einfluss der Undulatorstrahlung lässt sich reduzieren, indem ein Elektronenpuls mit geringerer Ladung genutzt wird, da die abgestrahlte Synchrotronstrahlungsleistung linear von der Ladung des Elektronenpulses abhängt. Für die Berechnung wurde eine Lochblende mit einem Radius von $r = 200 \mu\text{m}$ genutzt.

Die Berechnung der Temperaturentwicklung beider Strahlungsanteile ist in Abb. 7.7 für einen Diamantkristall mit einer Temperatur von $T_0 = 50 \text{ K}$ dargestellt. Die Temperatur des $42 \mu\text{m}$ dicken Kristalls steigt nach etwa $t = 50 \cdot t_{\text{sep}}$ auf $T = 82 \text{ K}$ an. Dieser Temperaturanstieg von $\Delta T = 32 \text{ K}$ ändert die reflektierte Photonenenergie des Kristalls um $\Delta E/E_{\text{H}} \approx 0.6 \cdot 10^{-6}$. Diese Verschiebung der Photonenenergie entspricht etwa 30 % der DARWIN-Breite.

Eine erste Betrachtung des Einflusses der Wärmelast auf die Verstärkung eines XFELs ergibt, dass eine Temperaturänderung des dünnen Kristalls auf etwa $T = 75 \text{ K}$ tolerierbar ist. Weitere detailliertere Untersuchungen müssen folgen. Verglichen mit der Temperatur des Kristalls ohne Undulatorstrahlung (siehe Abb. 7.4) ist der Effekt der spontanen Undulatorstrahlung auf die Temperatur auf den Kristall eher gering. Die hauptsächliche Erwärmung wird durch den XFEL-Puls verursacht. Eine Verringerung der Sättigungsenergie im Resonator hat den größten Einfluss auf die Temperatur des Kristalls.

100 pC Elektronpaket In Abbildung 7.8 ist die Temperaturentwicklung eines Diamantkristalls am Punkt $(r, z) = (0, 0)$ dargestellt für die Absorption der spontanen Undulatorstrahlung eines Elektronenpakets mit einer Ladung von $q = 100 \text{ pC}$. Der durch die spontane Undulatorstrahlung verursachte Temperaturanstieg im Kristall ist im Vergleich zu der Undulatorstrahlung eines Elektronenpakets mit $q = 1 \text{ nC}$ mit $\Delta T = 0.2 \text{ K}$ um einen Faktor zehn kleiner. Es stellt sich eine Gleichgewichtstemperatur nach $t = 10 \mu\text{s}$ von 50.3 K ein.

7.2. Temperaturverteilung mit 10 ns langen Pulsen

Die Darstellung der numerischen Berechnung der Temperatur von Diamantkristallen in Abb. 7.9 zeigt die Abhängigkeit der zeitlichen Temperaturentwicklung, hervorgerufen von zwei unterschiedlichen Pulsängen, auf der Undulatorachse. Der Temperatursprung nimmt mit zunehmender Pulslänge ab. Wird ein 10 ns langer Puls betrachtet, steigt die Temperatur über einen Zeitraum von 10 ns an. Das Maximum der Temperatur wird nach 10 ns erreicht. Dadurch ist die Temperatur zum Zeitpunkt $t = 10$ ns (maximale Temperatur) höher als im Fall der instantan absorbierten Energie. Zu Beginn ist die Temperatur zum Zeitpunkt direkt vor Absorption des folgenden Pulses für beide Fälle nahezu gleich. Im thermischen Gleichgewicht für den Zeitpunkt vor Absorption des folgenden Photonpulses liegt die Temperatur für den längeren Puls etwa 0.5 K unterhalb der Gleichgewichtstemperatur für den Fall der instantan absorbierten Energie.

Aus dieser Analyse erscheint es möglich, einen 10 ns langen Lichtpuls zu nutzen, um die zeitliche Temperaturentwicklung im Kristall nachzubilden, da die Temperatur vor der Absorption der Pulse und nicht die Temperatur 10 ns nach der Absorption der Pulse von Bedeutung ist. Der berechnete Unterschied ist im Hinblick auf die Temperaturänderung des Kristalls von etwa $\Delta T \approx 25$ K tolerabel.

Sollen die Effekte untersucht werden, die aufgrund des Temperatursprungs direkt nach Absorption des Lichtpulses auftreten können, muss ein entsprechend kürzerer Lichtpuls genutzt werden, wobei Effekte aus der Absorption des Laserlichts an der Absorptionskante zukünftig genauer betrachtet werden müssten. Vorteilhaft wäre hier, die Absorption eines einzelnen intensiven Röntgenlichtpulses, wie zum Beispiel Pulse des LCLSs oder anderer FELs im Röntgenbereich zu nutzen.

Wie aus den thermischen Simulationen zu erkennen ist, ist die thermische Last auf dem 42 μm dicken Diamantkristall bei reduzierter Sättigungsenergie des XFELs so hoch, dass die Temperatur des Kristalls um über 30 K ansteigen wird, wird eine Ausgangstemperatur des Kristalls von 50 K vorausgesetzt, die notwendig ist, damit der Kristall eine hohe Wärmeleitung hat. Dieser Temperaturanstieg ändert die Zentralwellenlänge der BRAGG-Reflexion um 30 % der DARWIN-Breite. Der Einfluss auf die Verstärkung eines XFELs ist nicht abschließend geklärt und muss noch weiter untersucht werden. Die Weiterentwicklung der FEL-Simulationen sind nächste Schritte, die durchgeführt werden müssen. Eine Lösung, um die durch die Temperaturänderung hervorgerufenen unterschiedlichen BRAGG-Wellenlängen auszugleichen, könnte eine geeignete Heizung sein. Diese erwärmt den kälteren Kristall auf die Temperatur des wärmeren Kristalls, um den Unterschied auszugleichen, damit beide Kristalle die gleiche Wellenlänge reflektieren.

Die Erwärmung des 150 μm dicken Diamantkristall bei reduzierter Sättigungsenergie ist aufgrund des geringeren Einflusses der ballistischen Effekte auf die Wärmeleitung deutlich geringer und stellt bei einer Ausgangstemperatur von 50 K kein Problem dar.

Die Nutzung von 10 ns langen Lichtpulsen für die Erzeugung eines vergleichbaren Temperaturfelds im Kristall ist möglich.

Die Auskopplung der Strahlung über einen Drei-Strahlfall sollte näher untersucht werden, denn die thermischen Eigenschaften dickerer Kristalle sind deutlich besser. Außerdem wird der Temperaturunterschied der Kristalle im Resonator kleiner sein, sodass sich die BRAGG-Wellenlängen der Kristalle nicht so stark gegeneinander verschieben.

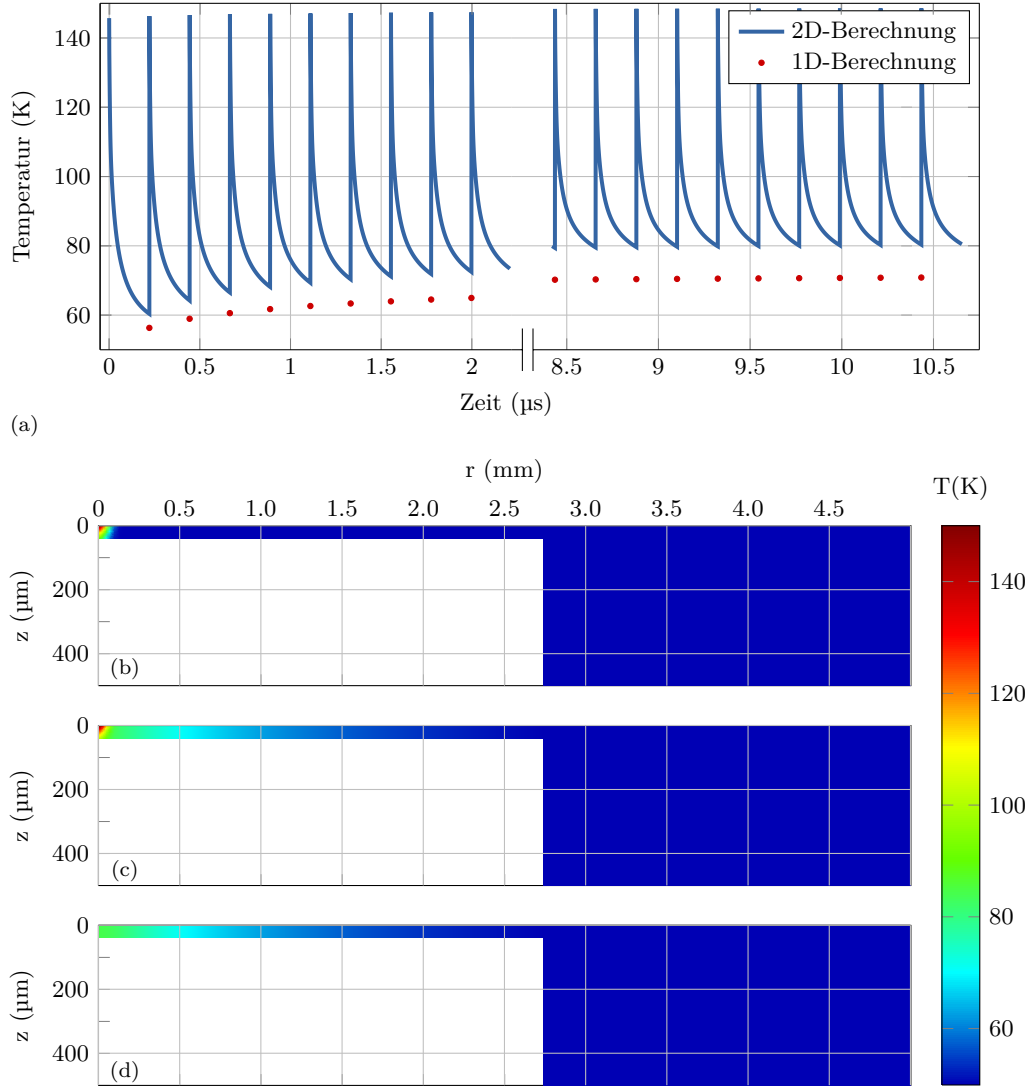


Abbildung 7.4.: Temperaturverteilung eines $d_{\text{Krist}} = 42 \mu\text{m}$ dicken Diamantkristalls mit einer Ausgangstemperatur von $T_0 = 50 \text{ K}$ für die Absorption eines Pulszugs von $E_{\text{Abs}} = 2 \mu\text{J}$ mit einem Pulsabstand von $t_{\text{Sep}} = 222 \text{ ns}$ und einem Strahlradius von $\sigma_{\text{R}} = 39 \mu\text{m}$. (a) Temperaturverlauf der Oberfläche des Kristalls auf der optischen Achse $(r, z) = (0, 0)$ in Abhängigkeit von der Zeit. (b) Temperaturverteilung im Kristall nach Absorption des ersten Pulses, (c) nach Absorption des letzten Pulses und (d) zum Ende der Simulation.

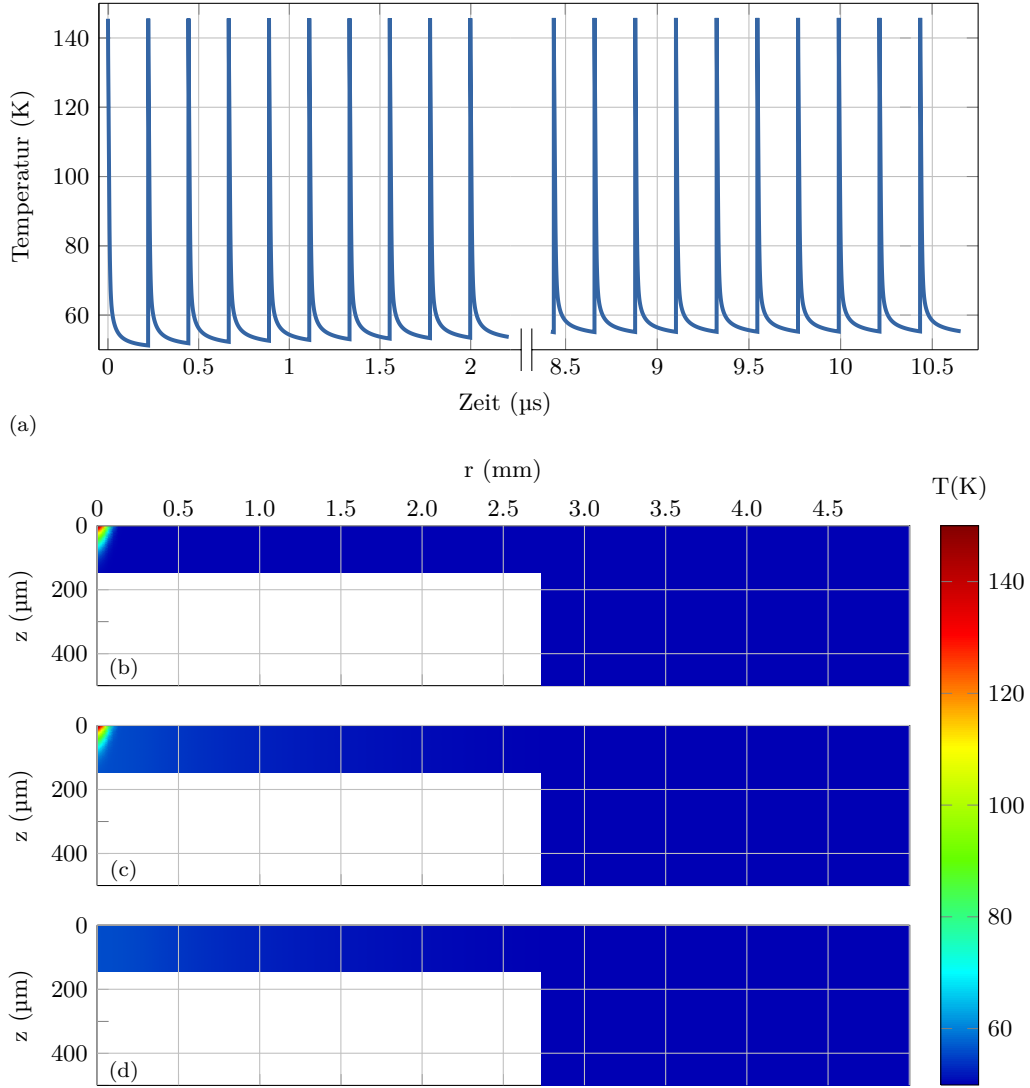


Abbildung 7.5.: Temperaturverteilung eines $d_{\text{Krist}} = 150 \mu\text{m}$ dicken Diamantkristalls mit einer Ausgangstemperatur von $T_0 = 50 \text{ K}$ für die Absorption eines Pulszugs von $E_{\text{Abs}} = 2 \mu\text{J}$ mit einem Pulsabstand von $t_{\text{Sep}} = 222 \text{ ns}$ und einem Strahlradius von $\sigma_R = 39 \mu\text{m}$. (a) Temperaturverlauf der Oberfläche des Kristalls auf der optischen Achse $(r, z) = (0, 0)$ in Abhängigkeit von der Zeit. (b) Temperaturverteilung im Kristall nach Absorption des ersten Pulses, (c) nach Absorption des letzten Pulses und (d) zum Ende der Simulation.

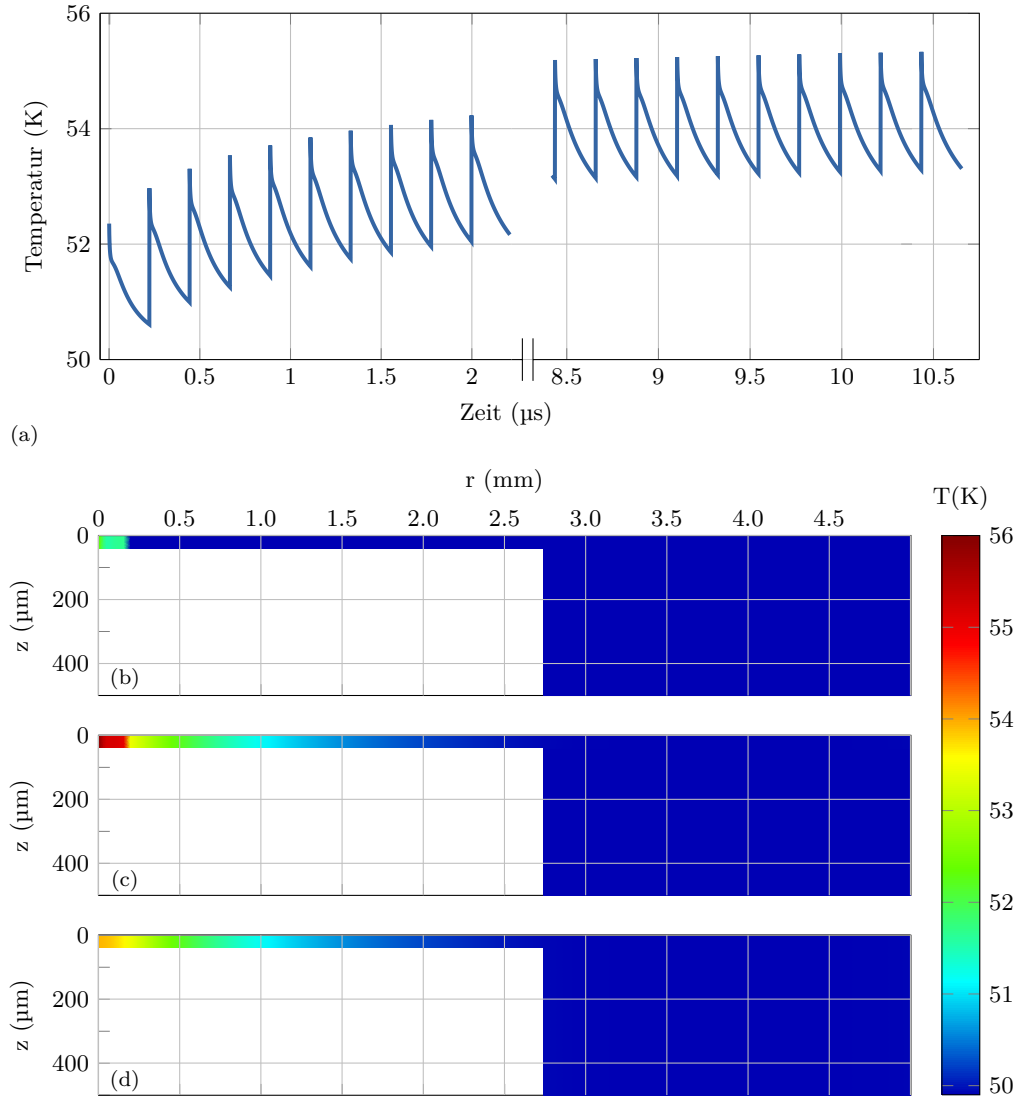


Abbildung 7.6.: Temperaturentwicklung eines $d_{\text{Krist}} = 42 \mu\text{m}$ dicken Diamantkristalls mit einer Ausgangstemperatur von $T_0 = 50 \text{ K}$ hervorgerufen durch einen Pulszug von Undulatorstrahlungspulsen eines 1 nC Elektronenpakets in Abhängigkeit von der Zeit mit einer Blende von $r = 200 \mu\text{m}$.

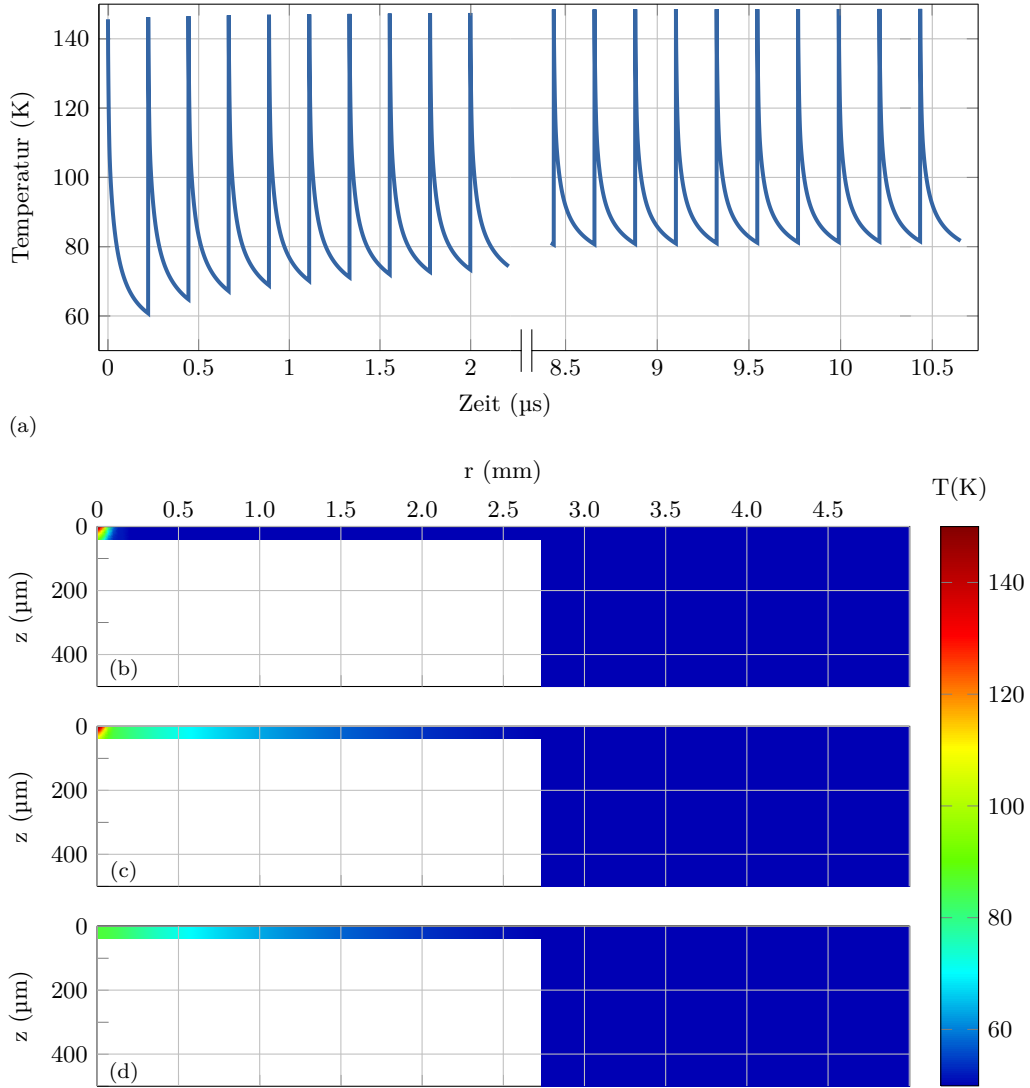


Abbildung 7.7.: Temperaturentwicklung eines $d_{\text{Krist}} = 42 \mu\text{m}$ dicken Diamantkristalls mit einer Ausgangstemperatur von $T_0 = 50 \text{ K}$ hervorgerufen durch einen Pulszug aus Undulatorstrahlungspulsen und XFEL-Pulsen ($E_{\text{Abs}} = 2 \mu\text{J}$) in Abhängigkeit von der Zeit mit einer Blende von $r = 200 \mu\text{m}$.

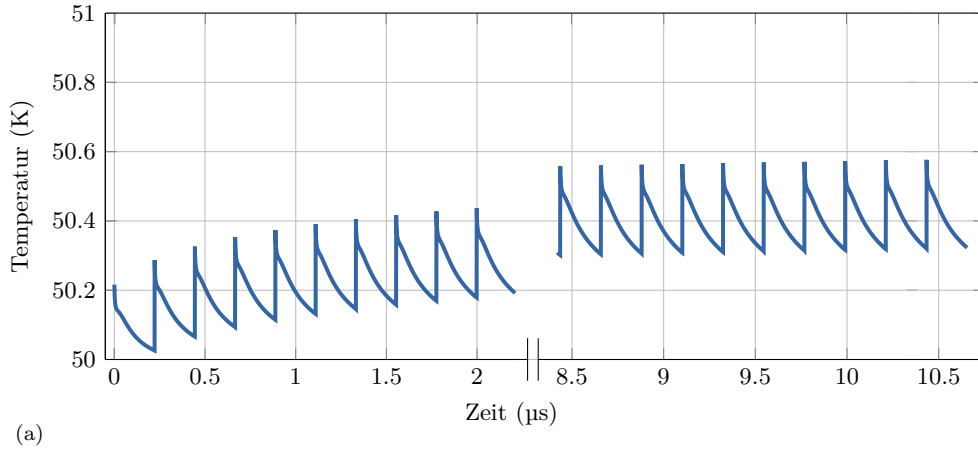


Abbildung 7.8.: Temperaturentwicklung eines $d_{\text{Krist}} = 42 \mu\text{m}$ dicken Diamantkristalls mit einer Ausgangstemperatur von $T_0 = 50 \text{ K}$ hervorgerufen durch einen Pulszug von Undulatorstrahlungspulsen eines 100 pC Elektronenpakets in Abhängigkeit von der Zeit mit einer Blende von $r = 200 \mu\text{m}$.

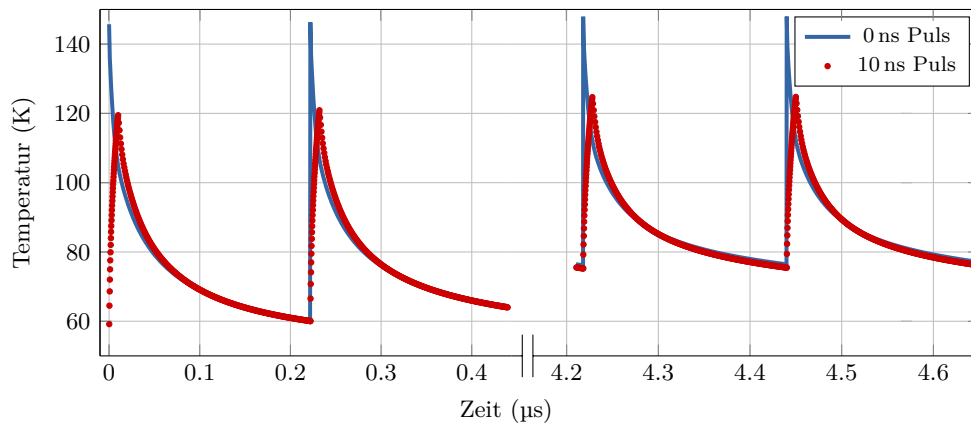


Abbildung 7.9.: Zeitliche Temperaturentwicklung von Diamant auf der optischen Achse an der Oberfläche hervorgerufen durch Absorption eines GAUSS-Pulses mit einer Energie $E_{\text{Abs}} = 2 \mu\text{J}$ und einem Radius von $t_{\text{sep}} = 39 \mu\text{m}$.

8. Experimenteller Aufbau zur Bestimmung der Wärmelastgrenzen der Bragg-Reflexion

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein experimenteller Aufbau zum Studium der Reflexionseigenschaften von BRAGG-Kristallen unter simulierten XFEL-Bedingungen entwickelt, um die voran diskutierten Ergebnisse (Berechnung der Pulsenergie der XFEL-Pulse und der thermischen Eigenschaften der BRAGG-Kristalle) zu verifizieren. Da derzeit keine Lichtquelle mit der spektralen Leistungsdichte und Repetitionsrate vorhanden ist, die den erwarteten Leistungsdichten eines XFELs entsprechen, wird in diesem Aufbau die absorbierte Energie der XFEL-Pulse mit einem Laser simuliert, dessen Wellenlänge so abgestimmt ist, dass die Eindringtiefe des Laserlichts der Eindringtiefe der BRAGG-Reflexion von 10 keV - 12 keV Photonen entspricht. Zusätzlich zum monochromatischen XFEL-Puls kann die Undulatorstrahlung, welche als Untergrund bei einem XFEL immer vorhanden ist, mit der Undulatorstrahlung eines Elektronenspeicherrings simuliert werden, dessen RÖNTGEN-Photonen gleichzeitig zur Analyse der Reflexionseigenschaften der BRAGG-Beugung dienen, wenn diese nicht vorher monochromatisiert wird. Die Laserquelle simuliert die Energiedeposition der XFEL-Pulse. Dazu sind für Silizium und Diamant zwei unterschiedliche Wellenlängen nötig. Licht mit einer Wellenlänge von $\lambda_{\text{Si,Laser}} \approx 800 \text{ nm}$ hat für Silizium eine Eindringtiefe von $l_{\text{Abs}} \approx 20 \mu\text{m}$, welches der Eindringtiefe l_{Ext} für 12 keV Photonen bei der BRAGG-Reflexion des Reflexes Si (5 5 5) entspricht mit einer Reflektivität von etwa $R_{\text{Si}} \approx 30 \%$ (siehe Abb. 8.1(rechts)) (PHILIPP *et al.*, 1960; MACFARLANE *et al.*, 1959). Die Wellenlänge, die eine Absorptionslänge in Diamant C (4 4 4) von $l_{\text{Abs}} \approx 20 \mu\text{m}$ hat, liegt bei etwa $\lambda_{\text{C,Laser}} \approx 220 \text{ nm}$ und wird zu etwa $R_{\text{C}} \approx 20 \%$ reflektiert (siehe Abb. 8.1(links)) (WALKER *et al.*, 1964; CLARK *et al.*, 1964).

8.1. Strahlfächer C am DORIS

Der experimentelle Aufbau ist derzeit zum Test im Experimentiergebiet des Strahlfächers C aufgestellt. Die Strahlungsquelle des Strahlfächers C ist ein Ablenkmagnet am Elektronenspeicherring **Doppel-Ring-Speicher** (DORIS). Dort steht RÖNTGEN-Licht (weiß oder monochromatisch) mit einem Pulsabstand von ca. 192 ns zu Verfügung. Im Gegensatz zu einer Undulator- oder Wigglerstrahlungsquelle ist die horizontale Divergenz eines Ablenkmagnets größer. Die horizontale Divergenz wird durch das nachfolgenden Kollimator (Spaltsystem) definiert. In Tab. 8.1 sind die Abstände der in der Strahlführung aufgestellten Komponenten aufgelistet.

In der Strahlführung sind zwei Spalten fest installiert. Mit diesen beiden Spalten kann die Strahlgröße und damit die Divergenz der Strahlung, die die Auflösung des jetzigen Aufbaus bestimmt, soweit reduziert werden, solange der Intensitätsmonitor (Ionisationskammer) ausreichend hohes Signal liefert, um die **Monochromatorstabilisierung** (MoStab) zu betreiben (Strahlgröße $> 1 \text{ mm}$). Für kleinere Strahlgrößen auf dem Kristall ist ein drittes Spaltsystem (IBC30HV, JJ X-Ray) direkt vor dem Experiment installiert. Der Monochromator, bestehend

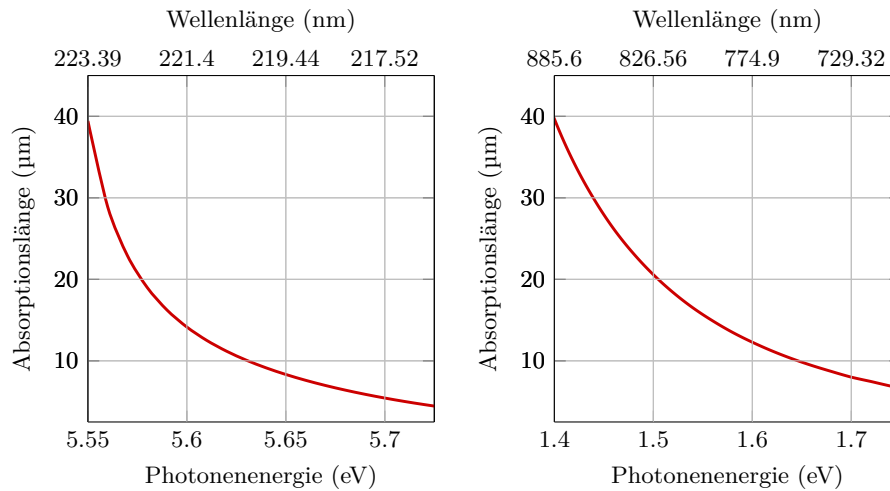


Abbildung 8.1.: Links: Absorptionslänge von Diamant im UV. Rechts: Absorptionslänge von Silizium im NIR.

Tabelle 8.1.: Parameter des C-Fächers

Strecke Quelle Spalt 1	18.45 m
Strecke Quelle Monochromator	19.0 m
Strecke Monochromator Spalt 2	9.80 m
Strecke Quelle Spalt 3	34 m

aus zwei Siliziumkristallen (111) bzw. (311), dient zur Monochromatisierung der Strahlung ($\Delta E_{\text{Phot}} \approx 1.5 \text{ eV}$, siehe Tab. 8.2). Der durch den Monochromator erzeugte horizontale Versatz beträgt konstant 20 mm. Der Absorber hinter dem Monochromator hat einen Schlitz, sodass RÖNTGEN-Licht direkt in das Experimentiergebiet geleitet werden kann, wenn mit unmonochromatisiertem Licht experimentiert wird. Die Parameter von DORIS und des Strahlfächers C sind in Tab. 8.2 zusammengefasst.

8.2. Aufbau im Experimentiergebiet C am DORIS

Im Experimentiergebiet sind auf einer $1.5 \text{ m} \times 1 \text{ m}$ großen Kunststeinplatte die mechanischen Komponenten für den Probenkristall und Analysatorkristall positioniert. In Abb. 8.3 ist der derzeitige Aufbau schematisch dargestellt (siehe auch Abb. 8.5). Die Streuebene der BRAGG-Kristalle ist horizontal (die Streuebene des Monochromators vertikal). Das RÖNTGEN-Licht aus einer Synchrotronstrahlungsquelle (momentan DORIS) wird auf den Probenkristall geleitet. Die Intensität des vom Probenkristall gebeugten Strahls wird einem Analysator gemessen. Bei einem Analysator bestehend aus einem BRAGG-Kristall und einer Lawinen-Photodiode (APD) müssen weitere Anforderungen an die Strahldivergenz gestellt werden, während Abb. 8.3 ein CAD-Modell zeigt. Wie in Abschnitt 8.3.1 gezeigt muss die Divergenz der Strahlung bei nur einem Analysatorkristall klein sein. Für einen Analysator, bestehend aus zwei BRAGG-Kristallen,

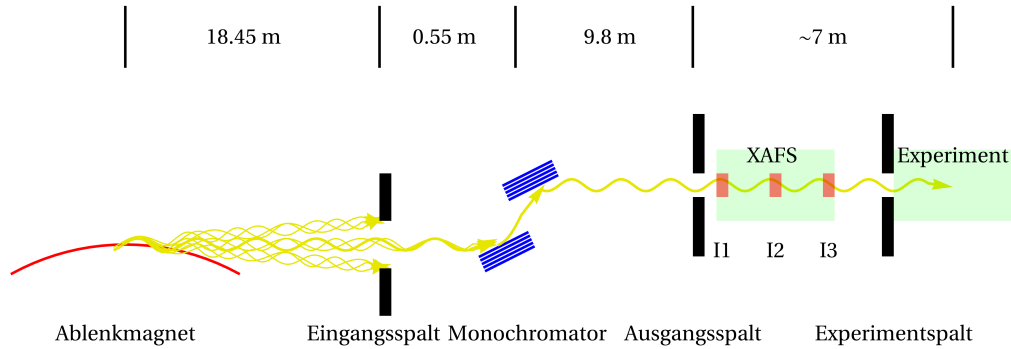


Abbildung 8.2.: Schematischer Aufbau des Strahlfächers C am DORIS. Die Strahlungsquelle des Strahlfächers C ist ein Ablenkmagnet. Die Strahlgröße kann mit Hilfe zweier Spaltsysteme vor dem Experimentiergebiet definiert werden. Das Spektrum der Strahlung kann mit einem Doppelkristallmonochromator eingeschränkt werden. Mit Hilfe von Ionisationskammern des XAFS Experiments (I1, I2, I3) kann die Strahlintensität gemessen werden. Ein weiteres Spaltsystem direkt vor dem Experiment wurde eingerichtet, um sehr kleine Strahlgrößen (μm) zu ermöglichen.

Tabelle 8.2.: Elektronen- und Photonenparameter für einen DORIS-Ablenkmagneten.

Elektronenenergie (GeV)	4.450	Photonenenergie (keV)	$\sim 5 - 16$
Strom (mA)	140.0	spek. Photonenfluss	$\sim 10^9$
		(Photonen/s/ $^2\text{mm}^2/0.1\%$ Bandbreite)	
horz. Emittanz (nm rad)	410.0	Spaltöffnung 1 mm	
vert. Emittanz (nm rad)	12.00	horz. Divergenz (mrad)	~ 12
Energiefehler (%)	0.110	Bandbreite (eV)	~ 1.6
Ablenkradius (m)	12.19	krit. Photonenenergie (keV)	16.04

muss keine Anforderung an die Divergenz gestellt werden (siehe Abschnitt 8.3.1). Eine solche Kristallanordnung ist in Abb. 8.4 schematisch dargestellt. Für deren Umsetzung sind weitere Aktuatoren für die Positionierung des dritten Kristalls notwendig. Unmittelbar neben der Anordnung wird auf einem weiteren optischen Tisch ($1.8\text{ m} \times 1.2\text{ m}$, Newport RS2000) das Lasersystem aufgestellt (siehe Abb. 8.5a und Abb. ??), dessen Lichtpulse über vier Spiegel und eine Linse auf den Probenkristall fokussiert werden (siehe Abb. 8.9). Die optischen Komponenten werden auf X-95 Profilen montiert.

8.2.1. Ausrichtung der Kristalle

Die Kristalle müssen in allen drei Rotationsachsen und zu den senkrecht zur Strahlachse verlaufenden räumlichen Achsen justiert werden können, um die Bedingungen, die für die BRAGG-Beugung notwendig sind, zu erfüllen. Die Rotationsachsen (r_z, r_y), die in den Netzebenen liegen, definieren den Winkel der BRAGG-Bedingung (vgl. Gl.3.1). Mit der Rotationsachse r_x senkrecht zur Netzebene wird Mehrfachbeugung vermieden (WECKERT *et al.*, 1997). Die beiden räumlichen Achsen (z, y) werden mit Lineartranslationen eingestellt. Dazu wurden vorhandene

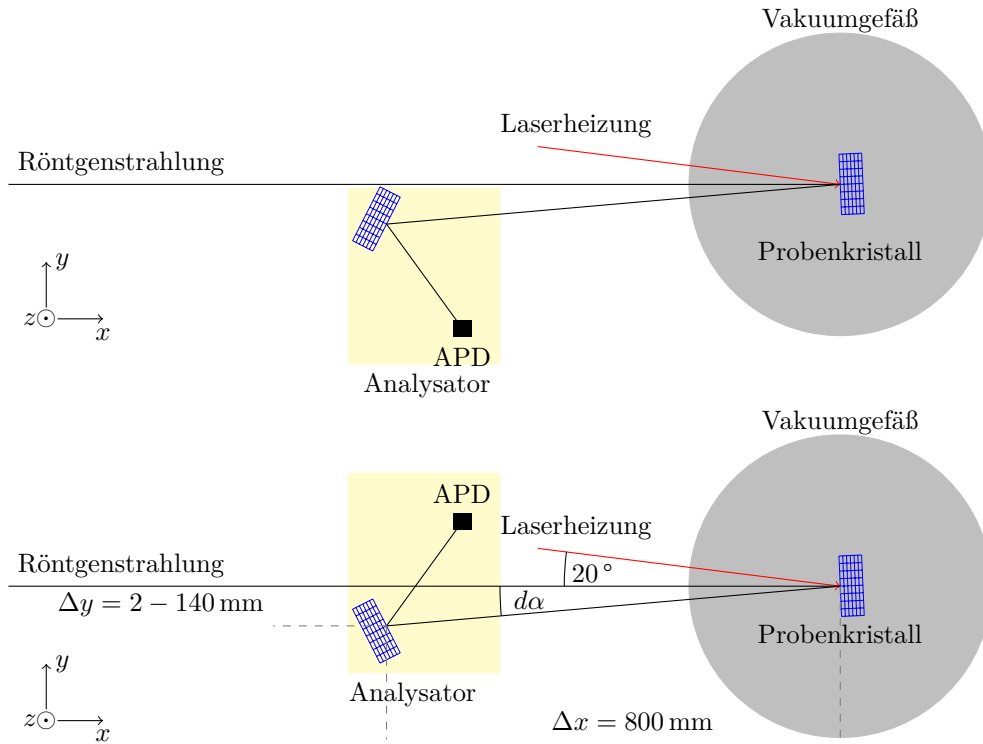


Abbildung 8.3.: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus mit einem Analysator mit einem Kristall und einem Intensitätsmonitor, hier einer Lawinen-Photodiode. Der RÖNTGEN-Strahl, monochromatisch oder weiß, wird auf den Probenkristall geleitet. Der gebeugte Strahl wird mit einem BRAGG-Kristall und einem Intensitätsmonitor analysiert. Eine zusätzliche Laserquelle mit einer auf den Kristall abgestimmten Wellenlänge simuliert den Energieeintrag der monochromatischen XFEL-Pulse. Oben: Schema stellt eine (+)-Anordnung dar. Unten: Schema stellt eine (---)-Anordnung dar.

Komponenten an das Experiment angepasst. Die Reihenfolge der Komponenten zur Justage der BRAGG-Kristalle ist: Hubtisch (z -Richtung), Lineartranslationstisch (y -Richtung), Goniometer (r_z -Rotationsachse) und 2-Kreis-Segment ($r_{x,y}$ -Rotationsachse). In Abb. 8.5(b),(c) ist für beide Kristalle (Probe, Analysator) der Aufbau schematisch dargestellt. In Tab. 8.3 sind die für die Justage der BRAGG-Kristalle und Detektoren genutzten Komponenten aufgelistet.

8.2.2. Wasserkühlung für Silizium-Kristalle

Auf dem 2-Kreis-Segment ist der Kristallhalter für Raumtemperatur angebracht (Im Fall des kryogenisch gekühlten Kristallhalters ist ein weiterer Kreutztisch zwischen Vakuumgefäß und 2-Kreis-Segment installiert). Dieser Kristallhalter ist für Messungen bei Raumtemperatur aus Aluminium gefertigt, an dessen Stirnfläche ein Kupferstück angebracht ist. Der Halter ist so gefertigt worden, dass die Stirnseite des Kupferblocks 6 mm hinter der vertikalen Rotationsachse (r_z) liegt, sodass die Oberfläche des Kristalls (Dicke der Siliziumkristalle 6 mm) auf der Rotationsachse r_z liegt. Das Kupferstück hat eine Bohrung an dessen Enden Schläuche befestigt werden können, um diese an einen Kälte-Umwälzthermostat anzuschließen. Mit Hilfe des Kälte-Umwälzthermostats (Julabo F25-HE) ist es möglich, den Kristall auf einer konstanten

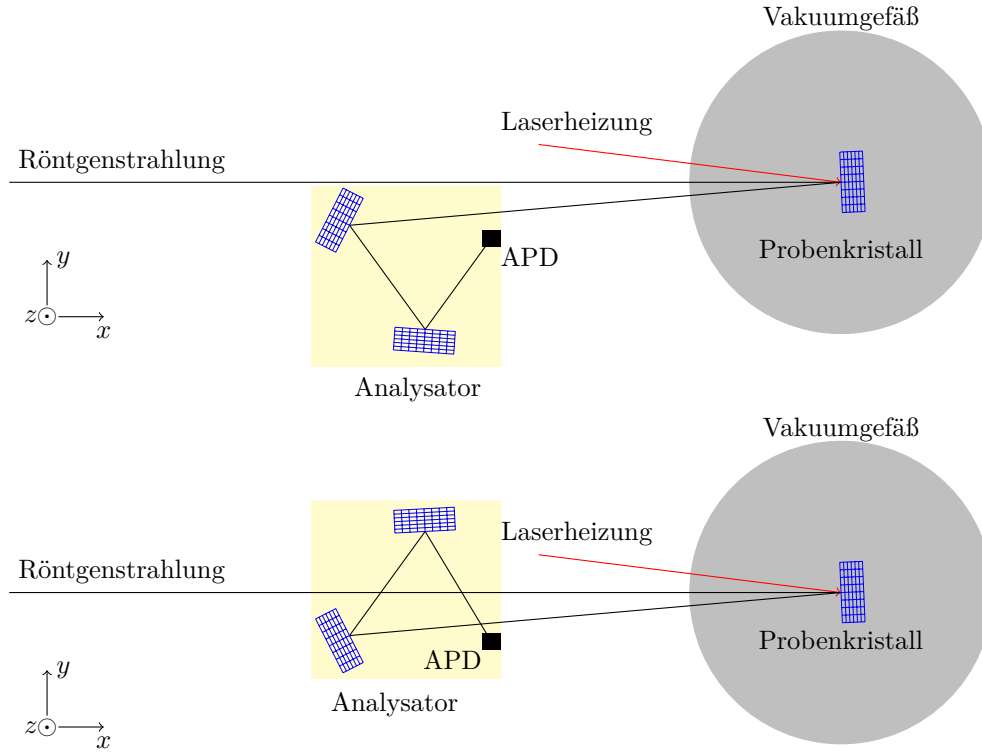


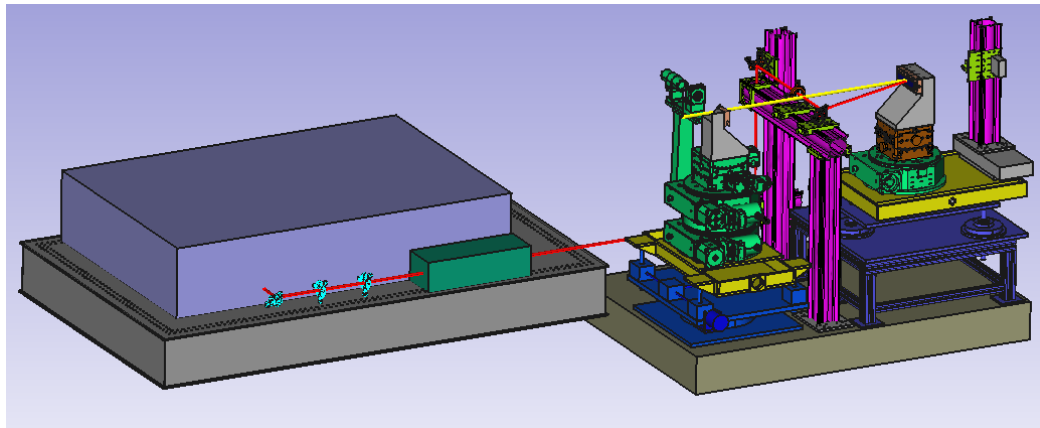
Abbildung 8.4.: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus mit einem Analysator aus zwei BRAGG-Kristallen in (oben) (+-)-Anordnung und (unten) (++)-Anordnung mit einem Intensitätsmonitor, hier einer Lawinen-Photodiode. Der RÖNTGEN-Strahl, monochromatisch oder weiß, wird auf den Probenkristall geleitet. Eine zusätzliche Laserquelle mit einer auf den Kristall abgestimmten Wellenlänge simuliert den Energieeintrag der monochromatischen XFEL-Pulse.

Temperatur zwischen 258 K und 373 K zu halten, je nachdem welches Kühlmittel verwendet wird.

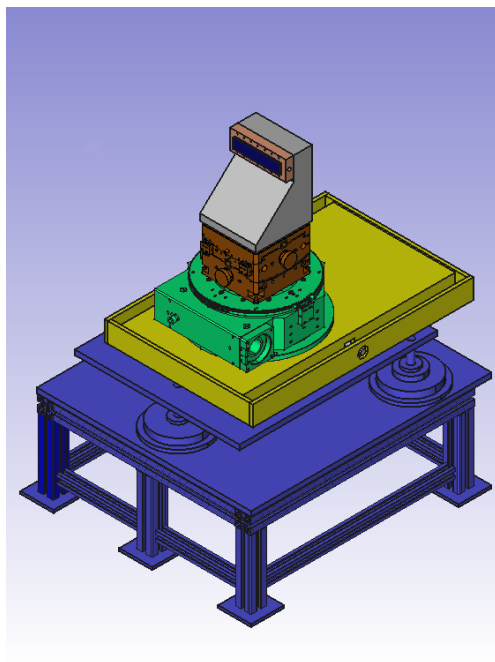
Der Kristallhalter für den Probenkristall kann bis zu $170 \text{ mm} \times 30 \text{ mm} \times 6 \text{ mm}$ lange Siliziumkristalle aufnehmen. Der Kristallhalter für den Analysatorkristall ist dem Aufbau des Probenkristallhalters ähnlich, nur dass dieser asymmetrisch ist (siehe Abb. 8.5c), damit der Halter nicht auf der Achse der einfallenden Strahlung liegt. Der Kristall ragt auf einer Seite des Halters 2 mm über die vertikale Drehachse (r_z) hinaus, um den BRAGG-Kristall möglichst nah an die Achse des Eingangsstrahls zu bringen und so BRAGG-Reflexe nahe der Rückstreuung zu untersuchen. Die hintere, zur Strahlachse gewandte, Ecke des Kristallhalters ist abgeschrägt, um einen möglichst großen Winkelbereich zu gewährleisten. Der maximale BRAGG-Winkel des Probenkristalls, der möglich ist, damit der gebeugte Strahl den Analysatorkristall trifft, ist

$$\theta_{B,max} = 0.5 \cdot \left(\pi - \frac{2 \text{ mm}}{800 \text{ mm}} \right) \approx \pi/2 - 1.25 \text{ mrad}.$$

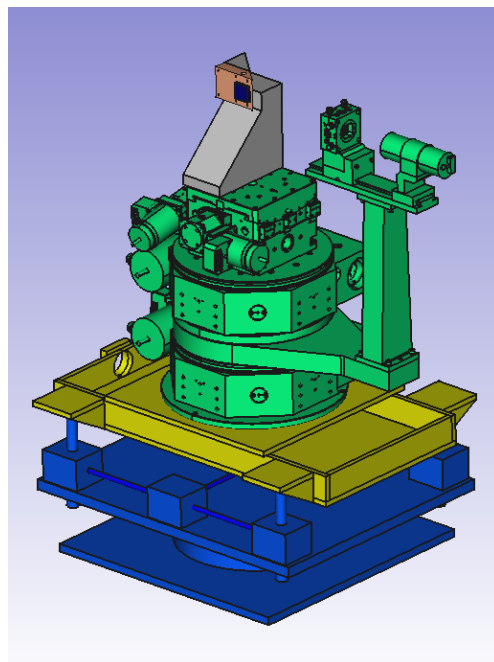
Der maximale Ablenkwinkel des Analysatorkristalls ist einerseits durch den Ausschnitt der Ecke gegeben und beträgt etwa 45° , wenn der gebeugte Strahl des Analysatorkristalls den Eingangsstrahl nicht kreuzt (vgl. Abb. 8.3 (oben)). Wird der Detektor auf der anderen Seite



(a)



(b)



(c)

Abbildung 8.5.: CAD-Darstellung des Experiments: (a) Gesamtansicht des Experiments mit Laser und vierte Harmonischen Generator (FHG) auf dem Lasertisch und Kristallhalter für Raumtemperatur auf der Kunststeinplatte. (b) Aktuatoren und Kristallhalter des Probenkristalls. (c) Aktuatoren, Kristallhalter und Detektor des Analysatorkristalls.

Tabelle 8.3.: Liste der genutzten Komponenten zur Justage der BRAGG-Kristalle. Δ ist der Verfahrweg und δ ist die Positionsgenauigkeit der entsprechenden Achse. (EK: Eigenkonstruktion)

Komponente	Probenkristall		Analysatorkristall	
Hubtisch	(EK) Mahle	$\Delta z = 100 \text{ mm}$	(EK)	$\Delta z = 80. \text{ mm}$
Lineartisch	(vorhanden)	$\delta z = 0.1 \text{ mm}$	(vorhanden)	$\delta z = 0.1 \text{ mm}$
	JJ-XRay	$\Delta y = 25. \text{ mm}$	(EK)	$\Delta y = 150 \text{ mm}$
	(vorhanden)	$\delta y = 0.1 \text{ mm}$	(vorhanden)	$\delta y = 0.1 \text{ mm}$
	Misumi KUB 1204-400-100	$\Delta y = 400 \text{ mm}$		
Goniometer	Huber 420	$\delta r_z = 10 \text{ } \mu\text{rad}$	Huber 422	$\delta r_z = 10 \text{ } \mu\text{rad}$
2-Kreis-Segment	Huber 5301.20	$\delta r_{x,y} = 80 \text{ } \mu\text{rad}$	Huber 5301.20	$\delta r_{x,y} = 80 \text{ } \mu\text{rad}$

der Strahlachse positioniert und der vom Analysator gebeugte Strahl kreuzt den Eingangsstrahl, ist der Winkel des Analysatorkristalls durch die Baugröße des Detektors begrenzt.

8.2.3. Kryogenisch gekühlter Kristallhalter

Wie aus Kap. 7 ersichtlich, muss die Temperatur der BRAGG-Kristalle für den Aufbau eines XFELs stark abgesenkt werden, damit die höhere Wärmeleitung bei kryogenischen Temperaturen ausgenutzt werden kann. Dazu muss der Kristallhalter thermisch von den ihn umgebenden Komponenten thermisch entkoppelt werden. Ein spezieller vakuumtauglicher glasfaserverstärkter Kunststoff (GFK), der unter anderem auch zur thermischen Entkopplung der HERA-Magnete und der TESLA-Beschleunigungsstrukturen dient (SCHMÜSER, 1985; EDWARDS, 1995), wird genutzt, um den Kristall thermisch von der Bodenplatte auf dem 2-Kreis-Segment zu entkoppeln.

In Abb. 8.6 ist der Aufbau schematisch aus unterschiedlichen Perspektiven dargestellt. Auf einem Flansch (ISO-K 240DN), der sechs Aufnahmen für GFK-Ständer hat, liegt eine GFK-Platte mit Aufnahmen für die GFK-Ständer. Darauf ist der Kristallhalter aus Kupfer über GFK-Abstandshülsen befestigt, der Silizium- oder Diamantkristalle aufnehmen kann.

Der Kaltkopf des Heliumkühlers wird mit einem Kupferblech und Indiumfolie, zur Erhöhung des thermischen Kontakts, an den Kristallhalter thermisch gekoppelt. Um die Temperatur einzustellen, wird ein 50 W Heizelement (HTR-50, LakeShore) in eine Bohrung des Kristallhalters eingebracht und mit einem Temperatursensor (Platinsensor, PT102, LakeShore) gemessen. Mit einer Steuerungseinheit (Model 336 oder 330, LakeShore) wird auf die gewünschte Temperatur geregelt. Der Kristall wird mit feinen Federblechen am Kristallhalter fixiert. Der Kristall kann entweder mit einer Wärmeleitpaste oder Indium-Gallium Legierungen thermisch an den Kristallhalter gekoppelt werden (VAN INGEN *et al.*, 1970; BLASDELL *et al.*, 1995). Die geeignetste thermische Kopplung des Kristalls an den Kristallhalter ist Gegenstand zukünftiger experimenteller Untersuchungen.

Ein Vakuumgefäß mit einem Innendruck von 10^{-6} mbar unterbindet den Wärmetransport der Luft (Konvektion). Das Vakuumgefäß ist ein Kreuz mit sechs Flanschen. Die oberen und unteren Flansche sind ISO-K 240DN Flansche, die seitlichen Flansche der Größe ISO-K 160DN. An zwei seitlichen Flanschen wird ein Flansch mit zwei Fenstern angebracht, um die RÖNT-

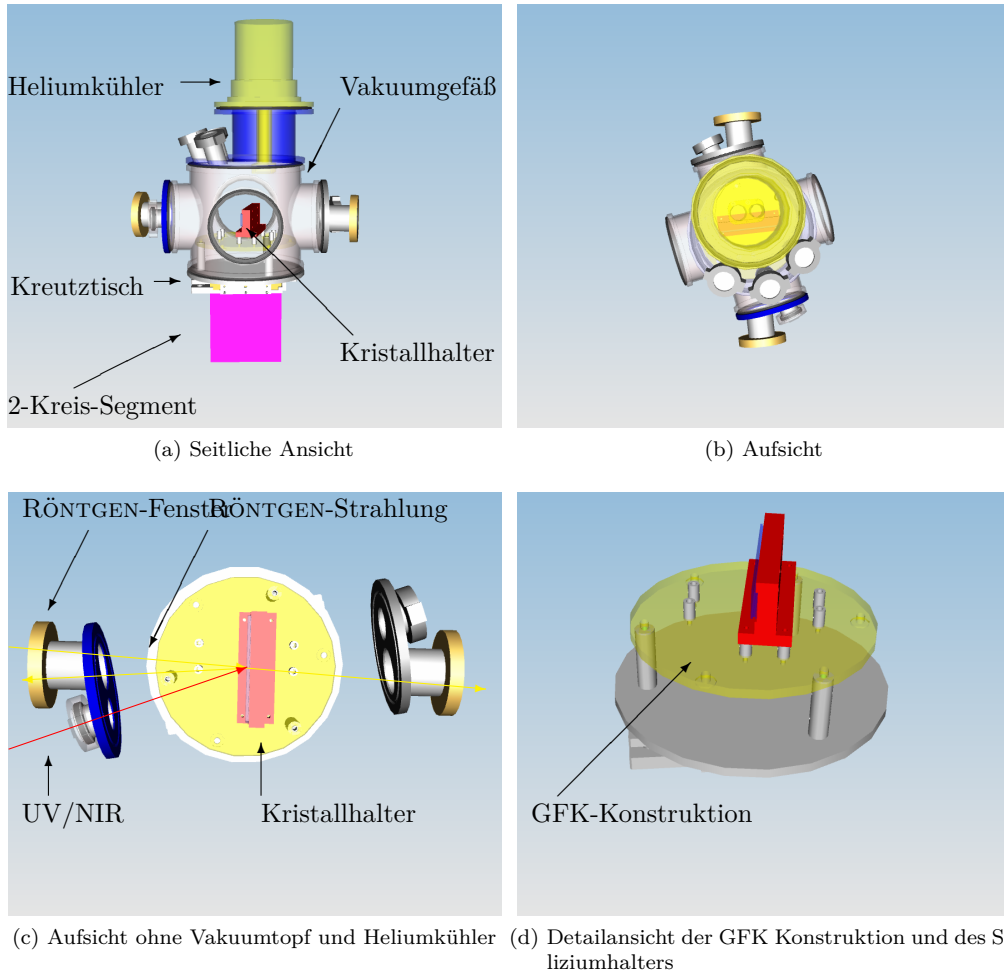


Abbildung 8.6.: (a) Seitliche Ansicht des Aufbaus für den kryogenisch gekühlten Kristall. Unter dem Vakuumpfäß ist ein manuell einstellbarer Kreuztisch zur Justage der Kristalloberfläche auf die senkrechte Drehachse r_z angebracht. Oben zu sehen ist ein Flansch mit ISO 40KF Flanschen zur Durchführung von Temperatursensorkabeln und Ansteuerung des Heizelements. Der Heliumkühler (gelb) ist oben auf dem Flansch angebracht und wird mit einem Kupferblech thermisch an den Kristallhalter (rot) gekoppelt. (b) Aufsicht auf den Vakuumpfäß mit Einkopplungsflanschen. (c) Links und rechts sind die Flansche zur Einkopplung des RÖNTGEN-Lichts bzw. der Laserpulse. Der Winkel zwischen den beiden Strahlachsen beträgt 20° . (d) Der Kristallhalter ist thermisch über ein aus GFK gefertigtes Ständer-Platte-Ständer-Gestell entkoppelt.

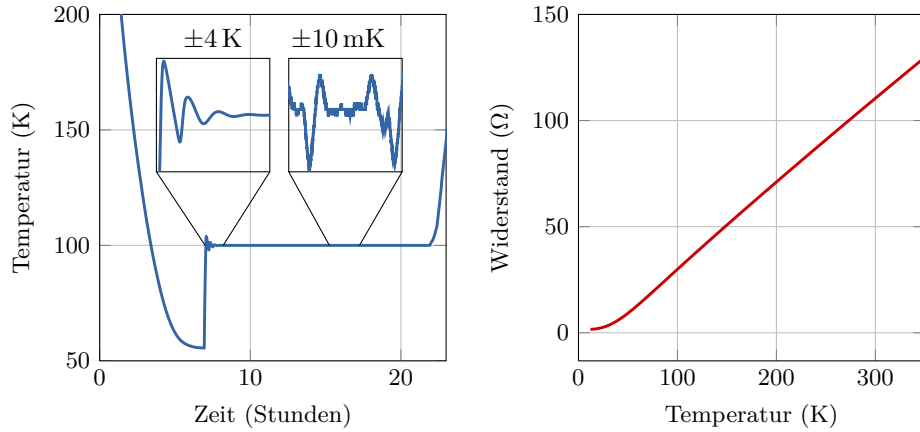


Abbildung 8.7.: Links: Messung der Temperatur des Kristallhalters gekühlt mit dem Heliumkühler, PTS8030-SO von TransMIT und einem PT102 von LakeShore als Temperatursensor, ausgelesen mit dem Temperaturcontroller Modell 336 von LakeShore. Zu Beginn erfolgt die Abkühlung des Kristallhalters. Die minimale Temperatur des Kristallhalters beträgt etwa 55 K. Die Temperatur des Kristallhalters wurde nach etwa 7 h auf 100 K geregelt. Nach etwa 22 h wird der Kristallhalter erwärmt. Rechts: Kalibrierung des PT102 Temperatursensors von Lakeshore (Daten von Lakeshore).

GEN-Strahlung und das Laserlicht durch zwei separate Fenster in die Vakuumkammer einzukoppeln. Die beiden optischen Achsen (RÖNTGEN-Licht und Nahe Infrarote Strahlung (NIR) bzw. Ultraviolette Strahlung (UV)) haben einen Winkel von 20° , da es nicht möglich ist, beide Wellenlängen durch dasselbe Fenster in den Vakuumtopf einzukoppeln. Das Fenster für das RÖNTGEN-Licht ist ein aufgefäster ISO-CF 63DN Flansch, auf dem eine $200 \mu\text{m}$ dicke Kaptonfolie aufgeklebt ist oder ein Berylliumfenster (Altechna). Durch die Apertur des Fensters für RÖNTGEN-Licht wird der Winkelbereich, der für Messungen zu Verfügung steht, auf $\pm 2^\circ$ eingeschränkt. Das Fenster für das NIR bzw. UV sind ISO-KF 40DN Flansche mit einem Quarzfenster (KMVPZ40-UVQ, KMVPZ40-EUVQ-VAR193, Vacom Vakuumtechnik GmbH) und haben eine Transmission von $T_{\text{NIR}} \approx 92\%$ bzw. $T_{\text{UV}} \approx 96\%$.

Um das Vakuum zu erzeugen wird eine „Scroll“-Vorpumpe (XDS 10, Edwards) und eine Turbomolekularpumpe (HiPace80, Pfeiffer) genutzt. Die Turbomolekularpumpe wird an einen freien, seitlichen Flansch angebracht und über Wellschläuche an die Vorpumpe angeschlossen. Ein Vakuummeter (Antimon, Vacom) zur Kontrolle des Vakuums ist auf einem oberen ISO 40KF Flansch installiert.

Diese Konstruktion ermöglicht, es den Kristallhalter und den Kristall mit einer Helium-Pulsröhre (PTS8030-SO, TransMIT) und einem Heliumkompressor (Coolpack 2000, Oerlikon) auf eine Temperatur von unter $T = 55 \text{ K}$ zu bringen (siehe Abb. 8.7). In Abb. 8.7 ist die Temperatur des Kristallhalters anschließend auf 100 K geregelt. Nach etwa sieben Stunden ist der Einschwingvorgang des Temperaturreglers (Proportional-Integral-Differential (PID)) zu erkennen. Mit den hier verwendeten Parametern der PID-Regelung dauert der Einschwingvorgang etwa 1 h, wobei die Parameter des PID-Reglers nicht optimiert worden sind und somit ein kürzerer Einschwingvorgang möglich ist. Die Temperatur ist über 10 h auf $\Delta T(\Delta t = 10 \text{ h}) = 3.7 \text{ mK}$ (rms) stabil. Diese Temperaturstabilität ist bei einer zu erwarteten Temperaturänderung des

Tabelle 8.4.: Parameter der Laserheizung.

<u>Quelle nach Pulserzeuger (AOM):</u>		
Wellenlänge	nm	785 – 900
Strahlqualität M^2		~ 1
Pulslänge t_{Phot}	ns	≥ 10
Pulsenergie ($t_{\text{Phot}} = 10 \text{ ns}$)	nJ	1
<u>Verstärker:</u>		
Wellenlänge	nm	800 – 890
Verstärkung		10^5
Pulsenergie ($t_{\text{Phot}} = 10 \text{ ns}$)	μJ	100
Strahlqualität M^2		~ 2
Strahldurchmesser	mm	10
<u>FHG:</u>		
Konversionseffizienz $\lambda \rightarrow \lambda/4$		15 %
Pulsenergie ($\lambda \approx 220 \text{ nm}$)	μJ	15
Strahldurchmesser	mm	2

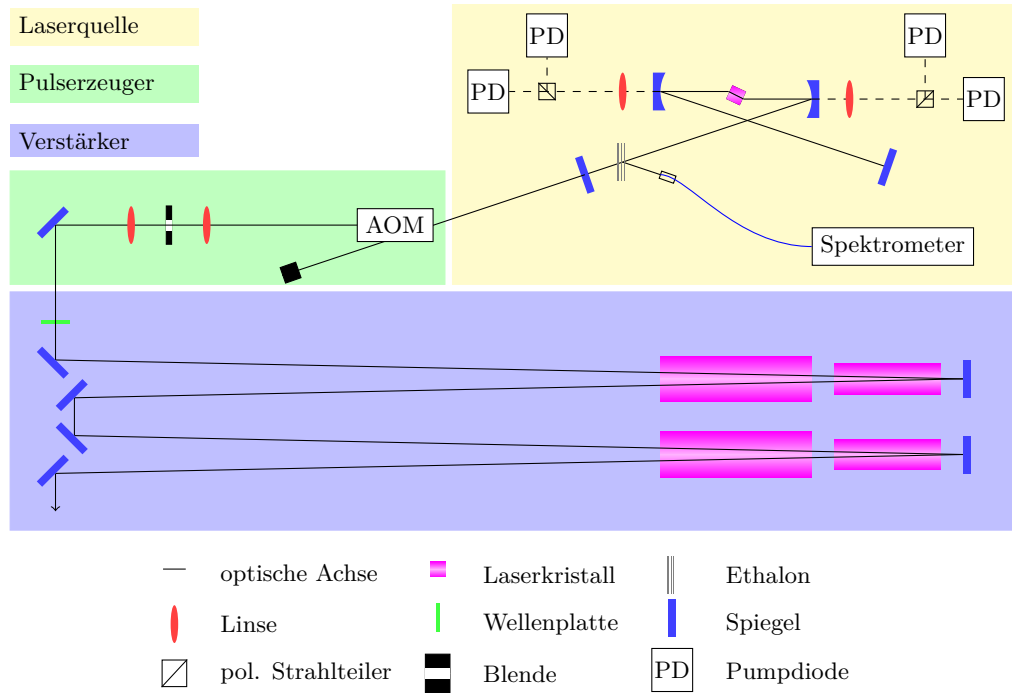
Kristalls von mehreren Kelvin ($\Delta T \approx 3 - 24 \text{ K}$) ausreichend.

8.2.4. Laserheizung

Ein auf **Chrom** dotiertes **Lithium-Strontium-Aluminum-Flourid** (Cr:LiSAF) Kristallen basierendes Lasersystem dient zur Deponierung von Energie in der oberen Schicht ($15 - 20 \mu\text{m}$) des Kristalls mit einer zeitlichen Struktur (siehe Abb. 8.8), die der des European XFEL gleicht. Um die XFEL-Pulse zu simulieren, muss ein Pulszug mit einer Repetitionsrate von 4.5 MHz für etwa $600 \mu\text{s}$ erzeugt werden, mit einer Pulsenergie von bis zu $1 - 100 \mu\text{J}$.

Die Wahl ein auf Cr:LiSAF-Kristallen basierendes System zu benutzen, hatte technische Gründe. Die Firma „Laserpath Technology Inc.“ hat die Entwicklung und die Konstruktion des Lasersystems übernommen. Cr:LiSAF-Kristalle haben eine Verstärkerbandbreite 780 nm bis 1010 nm , sodass die beiden benötigten Wellenlängen ($\lambda_{\text{Si}} \approx 800 \text{ nm}$ und $\lambda_{\text{C}} \approx 884 \text{ nm} \xrightarrow{4. \text{ Harm}} 221 \text{ nm}$) mit einem Lasersystem erzeugt werden können, um die nötigen Eindringtiefen in den Kristall zu gewährleisten. Vorteil dieses Kristalls gegenüber dem in diesem Spektralbereich üblichen **Titan-Saphir** (Ti:Sa) Kristallen ist die Wellenlänge der Absorptionsbanden von Cr:LiSAF, sodass mit Dioden bzw. Blitzlampen die Besetzungsinversion erzeugt werden kann. Außerdem hat Cr:LiSAF eine 20 mal längere Fluoreszenzzeit (FAN *et al.*, 2002) als Ti:Sa. Das erleichtert die Aufrechterhaltung der Besetzungsinversion über einen Pulszug von einer Länge von $600 \mu\text{s}$ durch einen entsprechenden längeren Blitz der Pumplampe des Verstärkers. In Abb. ?? ist die Laserquelle schematisch dargestellt. Die Laserquelle besteht aus drei Teilen: der Quelle, dem Pulserzeuger und dem Verstärker, einem sogenannten „Master-Oszillator-Power-Amplifier“ (MOPA). Tabelle 8.4 sind die Parameter des Lasers zusammengefasst.

Bevor ein neues Lasersystem angeschafft wurde, wurden die bei DESY eingesetzten Lasersysteme auf Tauglichkeit geprüft. Taugliche Ti:Sa-Systeme mit einer Repetitionsrate von 1 MHz ,



die hier am DESY verwendet werden, sind weitaus komplexer aufgebaut, als das hier zum Einsatz kommende Lasersystem und an deren Einsatzort keine RÖNTGEN-Strahlung ($\sim 12 \text{ keV}$) vorhanden ist. Die Komplexität ist notwendig, da dort kurze Lichtpulse erzeugt werden sollen ($t_{\text{Phot}} < 30 \text{ fs}$). Die Repetitionsrate der auf Pockels-Zellen beruhenden Laser liegt bei maximal bei 1 MHz, da die mit Hochspannung betriebenen Pockels-Zellen mit der Repetitionsrate des Lasers geschaltet werden müssen. Normalerweise liegt die Repetitionsrate im Bereich von kHz. Die Limitierung liegt in der schnell geschalteten Hochspannung für die Pockels-Zelle. Diese Laser besitzen ein gepulstes Pumplasersystem mit Neodym dotiertes Lithium-Yttrium-Fluorid (Nd:YLF)-Kristallen, der frequenzverdoppelt wird. Somit wird vor jedem Eingangspuls die nötige Besetzungsinversion in den Ti:Sa Kristallen erzeugt (Fluoreszenzzeit $\sim 3.5 \mu\text{s}$) (DRUON *et al.*, 2007).

Nachfolgend werden der Laseroszillator, der Pulserzeuger und der Verstärker näher beschrieben.

Laseroszillator

Der Laseroszillator in dem Lasersystem ist eine Dauerstrichquelle auf Basis eines Cr:LiSAF-Kristalls, der mit Dioden bei 660 nm gepumpt wird. Der Aufbau erfolgt nach DEMIRBAS *et al.* (2008, 2009); KOPF *et al.* (1997). Die Ausgangsleistung der Quelle beträgt $P_{\text{out}} > 120 \text{ mW}$. Mit einem Spektrometer und einem doppelbrechenden Filter (Ethalon) lässt sich die Wellenlänge zwischen 785 nm und 900 nm durchstimmen. Die Linienbreite des Laser ist kleiner als 1 nm. Der Strahl ist nahezu beugungslimitiert. Aufgrund einer Verzögerung beim Aufbau des Lasersystems berufen sich die hier gemachten Angaben auf Herstellerinformationen.

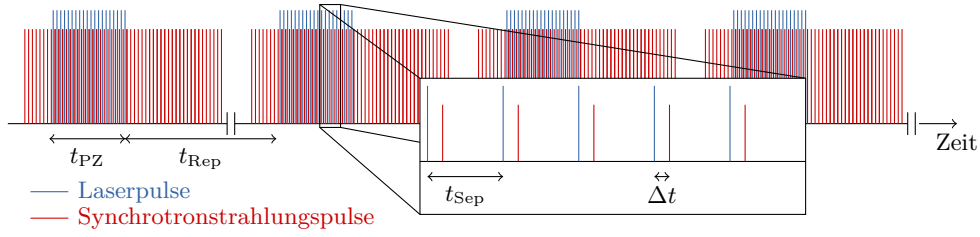


Abbildung 8.8.: Schematische Darstellung der Laserpulse und RÖNTGEN-Lichtpulse.

Pulserzeuger

Ein **Akusto-Optischer Modulator (AOM)** (GPM-400-100, Brimrose Corp.) generiert aus dem Dauerstrichlaser einen Pulszug von $600\text{ }\mu\text{s}$ Länge (siehe Abb. 8.8). Die zeitliche Struktur des Pulszugs und der Pulse innerhalb des Pulszugs lässt sich mit einem Pulsgenerator (9530, Quantum Electronics) bestimmen. Es werden 10 ns lange Pulse im Abstand von etwa $t_{\text{Sep}} \approx 200\text{ ns}$ erzeugt. Die Pulswiederholrate ist dabei durch den Elektronenspeicherring gegeben. Die Maschinenreferenzfrequenz des Elektronenspeicherrings ist der Trigger für den Pulsgenerator, um die Pulse des Lasers mit denen des Elektronenspeicherrings zu synchronisieren. Die minimale Pulsdauer ist aufgrund der Anstiegs- und Abfallzeiten des AOMs etwa 10 ns . AOMs mit schnelleren Anstiegs- und Abfallzeiten könnten genutzt werden, um kürzere Pulse zu erzeugen, was jedoch die maximale Pulsenergie reduziert. Dafür wäre eine gepulste Quelle sinnvoller, wobei der AOM als Pulpicker dienen könnte. In dem hier genutzten Laser ist es durch den Pulsgenerator, der mit der Maschinenreferenzfrequenz synchronisiert werden kann, möglich, die Länge des Zeitfensters zu bestimmen in denen die Pulse mit dem vorher definierten Zeitabstand erzeugt werden sollen. Ein räumlicher Filter erhöht den Kontrast zwischen den An- und Auszeiten des AOMs um den Faktor 20 (THUROW *et al.*, 2009).

Verstärker

Die hier verwandte Technik beruht auf Vorarbeiten von BEAUD *et al.* (1995). Der Verstärker besteht aus vier Cr:LiSAF Kristallen ($2 \times (7\text{ mm} \times 100\text{ mm})$ und $2 \times (10\text{ mm} \times 100\text{ mm})$), die in einem kleinen Winkel durchlaufen werden, um den einlaufenden und den auslaufenden Strahl zu separieren. Die Polarisierung des Lichts muss beim Durchgang durch den Kristall gleich bleiben, da eine Polarisierungsebene eine höhere Verstärkung aufweist (RAPOPORT, 1992; BEAUD *et al.*, 1995). Mit einer Wellenplatte vor den Verstärkerkristallen lässt sich die Polarisierung einstellen, sodass die Polarisierungsebene mit der höheren Verstärkung genutzt werden kann. Die Cr:LiSAF Kristalle werden mit jeweils zwei Blitzlampen (E2095, EM2095, Fenix) gepumpt, sodass innerhalb eines Zeitfensters von $600\text{ }\mu\text{s}$ Pulse aus der Quelle verstärkt werden. Der Strom der Blitzlampen wird mit einem Computer gesteuert und mit dem Pulserzeuger und der Quelle synchronisiert, damit die Pulsenergie über den Pulszug reguliert werden kann. Aufgrund der thermischen Eigenschaften des Kristalls (PILLA *et al.*, 2004), ist die Pulszugwiederholrate des Verstärkers mit der vorgesehenen Kühlung von $t_{\text{Rep}} = 3.3\text{ s}$ begrenzt. Die Verstärkung der Eingangspulse beträgt nach zweimaligem Durchlaufen der vier Kristalle 10^5 . Das M^2 beträgt etwa 2. Diese Aussagen beruhen auf Angaben des Herstellers.

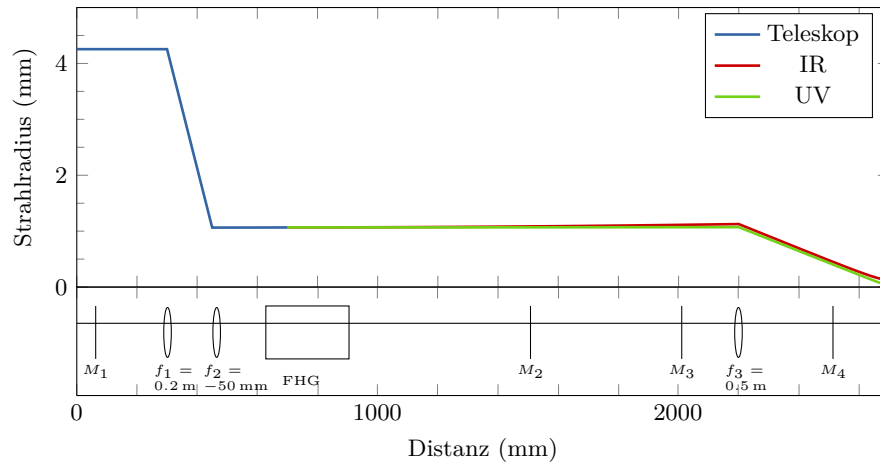


Abbildung 8.9.: Darstellung des optischen Wegs zwischen Laser und Kristall. Die Spiegel M_{1-4} und die Linsen f_{1-3} leiten den Strahl auf den Kristall. Die Linse f_3 fokussiert den Strahl auf den Kristall. Die Linsen $f_{1,2}$ bilden ein Teleskop, um den Strahlradius für den FHG zu verringern. In dieser Darstellung hat die fokussierende Linse f_3 die gleiche fokale Länge für infrarotes und ultraviolettes Licht. Das führt zu unterschiedlich großen Foki.

Generierung der vierten Harmonischen (FHG)

Die Konversion der Wellenlänge von 884 nm auf 221 nm erfolgt nach der Verstärkung mit einem Frequenzvervierfacher (UVISIR) mit einer Konversionseffizienz von etwa 15 % (Herstellerangabe). Die Konversion basiert auf einem nicht-linearen Kristall (Beta-Bariumborat) durch den das Licht geleitet wird (SUTHERLAND *et al.*, 2003). Der Puls hat, nachdem der Puls frequenzvervielfacht wurde, eine leichte transversale Elliptizität. Die Länge der Lichtpulse bleibt erhalten.

8.2.5. Propagation des Laserlichts zum Bragg-Kristall

Laser und FHG sind separat auf einem optischen Tisch direkt neben der Steinplatte aufgebaut. Auf dem optischen Tisch wird die Strahlgröße (Durchmesser) des Laserpulses über ein Teleskop von 10 mm auf 2 mm reduziert, um den Laserstrahl in den FHG einzukoppeln. Der Puls aus dem FHG wird weiter über drei Spiegel zum Kristall geleitet. In Abb. 8.9 ist die Propagation des Lichts vom Laser zum Kristall dargestellt.

8.3. Messmethoden

In diesem Abschnitt sollen die Messungen erläutert werden, die mit dem beschriebenen Experiment möglich sind. Außerdem wird untersucht, wie die Temperaturabhängigkeit der reflektierten Wellenlänge die messbare Intensität des Lichts beeinflusst. Dazu werden die DUMOND-Diagramme der möglichen Kristalle diskutiert. In Abb. 8.10 sind Proben- und Analysatorkristall für einen BRAGG-Winkel von $\theta_B = 89^\circ$ dargestellt. Als letztes wird eine Messung vorgestellt, die am DORIS durchgeführt worden ist.

8.3.1. Reflektive Messung

Bei der reflektiven Messung wird die Intensität der gebeugten Strahlung des Probenkristalls nach einem zweiten geeigneten BRAGG-Kristall und einem Detektor gemessen. Ein geeigneter Detektor ist eine APD. Eine APD hat eine ausreichend hohe Empfindlichkeit und Auslesegeschwindigkeit, um die gebeugten Photonen der einzelnen Pulse zu detektieren (KISHIMOTO, 1998). Die Zeitauflösung einer APD liegt im sub-nanosekunden Bereich, wobei höchste Auslesegeschwindigkeit und höchste Sensitivität nicht gleichzeitig erreicht werden kann. Die Divergenz des Eingangsstrahls muss bei der Nutzung eines einzelnen Analysatorkristalls gleich dem Winkelbereich des Proben- und Analysatorkristalls sein, in dem beide Kristalle gleichzeitig reflektierend sind (siehe Abb.8.10 (links)). In diesem Fall beträgt die Änderung der Fläche 5 % bei einer Änderung der Gitterkonstanten des Diamantkristalls um $\Delta a_0/a_0 = 5 \cdot 10^{-7}$. Abbildung 8.11 (rechts) zeigt die theoretische Änderung des Signals, normiert auf das Signal ohne modifizierte Gitterkonstante in Abhängigkeit von der relativen Änderung der Gitterkonstanten (blau). Es wurde bei dieser Betrachtung angenommen, dass die Flächenänderung gleich der messbaren Intensitätsänderung ist. Die Anforderung an die Divergenz der Eingangsstrahlung ist mit etwa 5 μ rad hoch, verglichen mit der Undulatorstrahlung aus einem Elektronenspeicherring, dessen Divergenz etwa 170 μ rad beträgt. Die Anforderung an die Kollimation der Eingangsstrahlung kann außer Acht gelassen werden, in dem ein zweiter Analysatorkristall hinzugefügt wird. Die Analysatorkristalle müssen in einer (++)-Anordnung aufgestellt werden. Diese Anordnung schränkt den transmittierten Energie-Winkel-Raum stark ein. Abbildung 8.11 (links) zeigt eine solche Anordnung als DUMOND-Diagramm mit einem Diamantkristall C(444) und zwei Siliziumkristallen Si(555). Die theoretische Signaländerung ist in Abb. 8.11 (rechts) dargestellt (rot). Durch die Verwendung eines zweiten Kristalls im Analysator kann die Sensitivität der Messung erhöht werden. Außerdem ist es bei dieser Anordnung möglich, einen vorher nicht monochromatisierten und unkollimierten Strahl zu nutzen und so die Wärmelast der Undulatorstrahlung bei der thermischen Betrachtung mit zu berücksichtigen. In beiden Fällen ist die Sensitivität auf die Änderung der Gitterkonstanten ausreichend, um eine Änderung der Reflektivität innerhalb der DARWIN-Breite eines Diamantkristalls zu untersuchen.

Am Strahlfächer C konnte eine solche kleine Strahldivergenz nicht erreicht werden. Erste Resultate die den Aufbau charakterisieren, sind in Abb.8.12 gezeigt. Mit einem **Y**ttrium-**A**luminum-**G**ranat (YAP) Szintillator (C48YP12P, FMB Oxford) und der Ausleseelektronik (Cyberstar, FMB Oxford) wurde die Strahlung detektiert, nachdem sie von dem Probenkristall Si(555) und dem Analysatorkristall Si(333) gebeugt wurde. Die Abb. 8.12 (links) zeigt die Abhängigkeit der Reflektivität der Kristallanordnung vom Winkel des Probenkristall (r_z). Außerdem ist die Simulation des Strahlungstransports des Experiments für diese Messung mit dargestellt. Diese Simulationen werden mit MATHEMATICA berechnet (vgl. Abschnitt E). Wie zu erkennen ist, stimmen Messung und Simulation des Experiments überein. Die Breite der Winkelabhängigkeit ist für den Analysatorkristall etwa doppelt so groß wie bei Drehung des Probenkristalls. Dies hängt mit der Winkeländerung der Strahlung bei Änderung des Kristallwinkels zusammen. Wird der Probenkristall um einem Winkel $d\alpha$ gedreht, ändert sich die Richtung des Strahls um $2d\alpha$. Somit ändert sich der Einfallswinkel auf dem Analysatorwinkel doppelt so stark. Die Messung zeigt, dass der experimentelle Aufbau die erwarteten Resultate

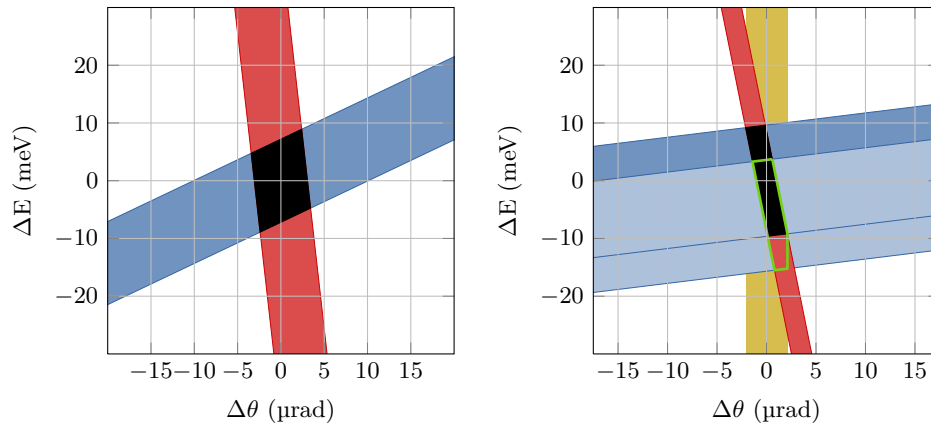


Abbildung 8.10.: Links: DuMond-Diagramm für zwei Siliziumkristalle Si(555) (blau) und Si(333) (rot) bei 9.911 keV in (++)-Konfiguration, wie bei der Messung aus Abb. 8.12. Rechts: DuMond-Diagramm für einen Diamantkristall (blau) C(444) bei 12.0697 keV und einen Siliziumkristall Si(555) (rot). Der schwarze Bereich kennzeichnet die Energien und Winkel für den beide Kristalle gleichzeitig reflektierend sind. Gelb zeigt die Energie-Winkelverteilung der Eingangsstrahlung die nötig ist, um eine Signaländerung zu messen, wenn der Analysator aus einem BRAGG-Kristall besteht. In hellblau ist ein Diamantkristall mit einer modifizierten Gitterkonstanten von $\Delta a_0/a_0 = 5 \cdot 10^{-7}$ dargestellt. Die grün umrandete Fläche ist der gemeinsame Energie-Winkelbereich zwischen dem Siliziumkristall und dem Diamantkristall mit modifizierter Gitterkonstante.

im Rahmen des derzeitigen Aufbaus wiedergibt.

8.3.2. Transmittive Messung

In diesem Fall wird der transmittierte Anteil des Strahl untersucht. Es ist hierbei nötig einen vorher monochromatisierten Strahl in der Größenordnung der DARWIN-Breite des untersuchten Kristalls zu nutzen, da sonst der transmittierte Anteil der Strahlung außerhalb der BRAGG-Reflexion die Signaländerung überstrahlt. Außerdem ist es notwendig einen, im Vergleich zur Photoabsorptionslänge, dünnen Kristall zu verwenden. Im Fall eines Diamantkristalls stellt dieses kein Problem dar, da die Photoabsorptionslänge für 12 keV Photonen etwa 3 mm beträgt.

Die gemessene Intensität hinter dem BRAGG-Kristall ändert sich in Abhängigkeit von der Temperatur des Kristalls, da sich die BRAGG-Energie durch die von außen zugeführte Energie ändert. Liegt die Verschiebung der BRAGG-Energie innerhalb der DARWIN-Breite des Kristalls ist die gemessene Intensität minimal. Ist die Temperaturänderung und damit die Änderung der BRAGG-Energie größer als die DARWIN-Breite des Kristalls, nimmt die Intensität zu, da sich die Eindringtiefe in den Kristall ändert (vgl. Abb. 3.5). Es können in diesem Fall beide Strahlungsanteile gemessen werden, der reflektierte und der transmittierte Anteil der Strahlung.

Die Konzeption eines Experiments zur Bestimmung der Wärmelastgrenzen der BRAGG-Reflexion für den Fall eines Pulszugs von RÖNTGEN-Lichtpulsen einer XFEL-Strahlungsquelle ist in diesem Kapitel vorgestellt. Teilkomponenten wurden getestet. Die Temperatur des Probenkristalls kann auf etwa 55 K abgesenkt werden, wobei mit einem leistungsfähigeren Kühler auch Temperaturen von unter 50 K erreichbar sind. Die Temperatur kann mit einer Tempera-

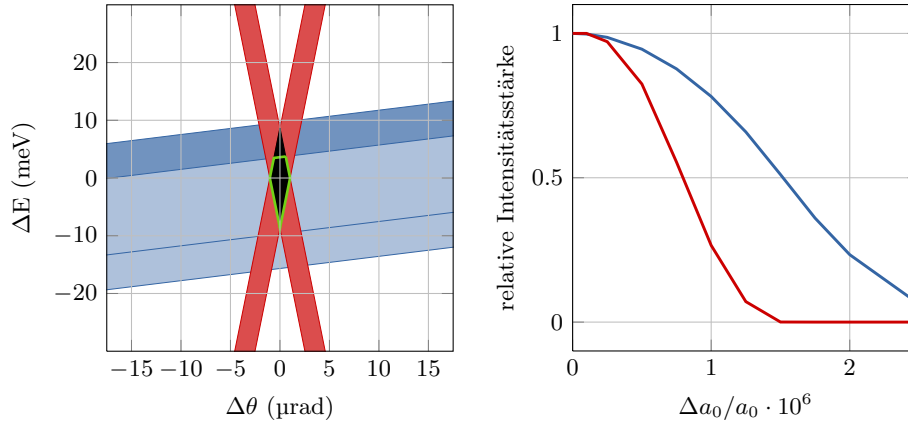


Abbildung 8.11.: Links: DUMOND-Diagramm für einen Diamantkristall (blau) C (444) bei 12.0697 keV und zwei Siliziumkristalle Si (555) (rot) in ++ Anordnung. Der schwarze Bereich kennzeichnet die Energien und Winkel für den beide Kristalle gleichzeitig reflektierend sind. In hellblau ist ein Diamantkristall mit einer modifizierten Gitterkonstanten von $\Delta a_0/a_0 = 5 \cdot 10^{-7}$ dargestellt. Die grün umrandete Fläche ist der gemeinsame Energie-Winkelbereich zwischen dem Siliziumkristall und dem Diamantkristall mit modifizierter Gitterkonstante. Rechts: Normierte Intensität in Abhängigkeit von der relativen Änderung der Gitterkonstanten für die Kristallanordnung aus Abb. 8.10 (rechts) in blau dargestellt und für die Kristallanordnung Abb. 8.11 (links) in rot dargestellt.

turreglung auf eine feste Temperatur (~ 4 mK (rms)) stabilisiert werden. Die Sensitivität des experimentellen Aufbaus erlaubt es, die temperaturbedingte Änderung der Gitterkonstanten zu messen. Die Messwerte des Aufbaus, getestet am Strahlfächer C stimmen mit den erwarteten Werten überein. Bisher wurde mit Siliziumkristallen gemessen. Ein Kristallhalter für Diamantkristalle wurde bisher nicht für Messungen eingesetzt.

Aufgrund von Lieferverzögerungen des Lasersystems konnten keine abschließenden Messungen mit dem experimentellen Aufbau durchgeführt werden, um die Wärmelastgrenzen der BRAGG-Reflexion zu bestimmen. Die nächsten Schritte sind die Integration des Lasersystems in den experimentellen Aufbau sowie Messungen mit einem kryogenisch gekühlten Silizium- und Diamantkristallen. Um unabhängig von der Divergenz der Eingangsstrahlung zu sein und um den Einfluss der Undulatorstrahlung auf die Reflexionseigenschaften zu messen, ist eine Erweiterung des Experiments um einen weiteren Analysatorkristall sinnvoll.

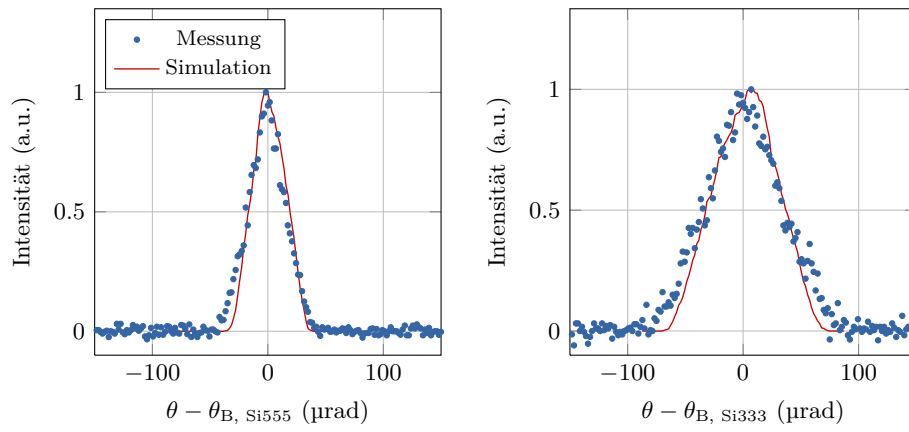


Abbildung 8.12.: Messung der Reflektivität in Abhängigkeit vom Winkel (links) des Probenkristalls Si (555) und (rechts) Analysatorkristall Si (333) für eine Photonenenergie von $E_{\text{Phot}} = 9.911 \text{ keV}$.

9. Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Konzept zur Erzeugung von nahezu vollständig kohärenter RÖNTGEN-Strahlung untersucht. Die Erzeugung des Lichts beruht auf einem FEL. Ein Undulator erzeugt einen elektromagnetischen Puls, der über BRAGG-Kristalle wieder zurück zum Anfang des Undulators geleitet wird. Dieser Puls wird mit einem nachfolgenden Elektronenpaket zum Überlapp gebracht, damit der Puls verstärkt wird. Dafür muss die Repetitionsrate der Elektronenpakete im Bereich von einigen MHz hoch liegen, damit der Oszillator eine annehmbare Länge hat. Die Verstärkung eines FELs hängt stark von den Parametern des Elektronenpakets ab. Der Elektronenbeschleuniger des European XFELs bietet, aufgrund seiner Nutzung als Treiber eines SASE-FELs, geeignete Elektronenparameter. Die Photonenparameter eines SASE-Pulses, wie sie auch vom European XFEL erzeugt werden, haben eine geringe longitudinale Kohärenz. Eine „Self-Seeded“-Option, die Pulse longitudinal kohärent macht, wird die Undulatorlänge, wegen der Monochromatisierung der Strahlung während der Verstärkung und des daraus resultierenden Intensitätsverlusts, verlängern.

Das hier vorgestellte Konzept besteht aus einem kürzeren Undulator (≈ 15 m) verglichen mit einem SASE-Undulator und einem Oszillator aus BRAGG-beugenden Diamantkristallen, die die Strahlung wieder zum Undulatoranfang zurückleiten und den Undulator mit einem nachfolgenden Elektronenpaket durchläuft. Die Länge des Oszillators ist durch die Pulswiederholrate des European XFELs gegeben. Die maximale Pulswiederholrate liegt bei 4.5 MHz, was einem 33 m langen Oszillator (Umlauflänge 66 m) entspricht. Resonatoren aus zwei BRAGG-Kristallen können nur in diskreten Schritten Wellenlängen generieren, indem der BRAGG-Reflex des Kristalls geändert wird. Eine Kristallkonfiguration aus vier Kristallen ermöglicht es, die Wellenlänge in einem schmalen Wellenlängenintervall ($\sim 0.5\%$ der Zentralwellenlänge) kontinuierlich durchzustimmen.

Numerische Berechnungen des FEL-Prozesses führen zu dem Ergebnis, dass der Betrieb eines XFELs unter bestimmten Voraussetzungen möglich ist. Die gespeicherte Energie im Oszillator wird hauptsächlich durch die Leistung des Elektronenstrahls und der relativen Energieabweichung von der Sollenergie der Elektronen bestimmt. Diese beiden Parameter erlauben es, die gespeicherte Energie im Resonator soweit einzustellen, dass die absorbierte Energie die eingesetzten Diamantkristalle nicht so weit erwärmen und damit die Gitterkonstante ändern, wodurch die reflektierte Wellenlänge innerhalb der ursprünglichen Reflexionsbandbreite bleibt. Für ein Ladungspaket mit einer Ladung von 1 nC liegt die minimale Sättigungsenergie eines Standard-Elektronenpakets bei etwa 200 μ J, wobei etwa 1 % von den Kristallen absorbiert wird. Die Gesamtrefektivität eines Umlaufs beträgt über 90 %. Ein Lichtpuls mit maximaler Sättigungsenergie lässt sich aufgrund der hohen Wärmelast nicht speichern, da ein solcher Puls die Kristalle zu stark erwärmen würde. Ein weiterer Aspekt dieser Arbeit ist, einen Pulszug aus Elektronenpaketen, die in einem vorangestellten Undulator einen SASE-Puls erzeugt haben, zu nutzen, um mit diesen Elektronenpaketen, die eine etwa zehn mal höhere Standardabweichung

chung der Elektronenenergieverteilung haben, einen RÖNTGEN-Lichtpuls mit einem XFELo zu erzeugen. Dies ist aufgrund des mehrmaligen Durchlaufens des Undulators trotz geringerer Verstärkung möglich. Die Anzahl der Umläufe erhöht sich dabei von etwa 40 Umläufen auf etwa 500 Umläufe bis zur Sättigung der gespeicherten Photonenpulsenergie.

Ein Vergleich der Ergebnisse der Berechnungsprogramme GINGER und GENESIS und einem entwickelten Propagationsprogramm liefert qualitative gut übereinstimmende Ergebnisse. Die Sättigungsleistung von GINGER beträgt etwa 80 % der Sättigungsleistung von GENESIS. Die Verstärkung ist bei GINGER etwa doppelt so groß, wie bei der von GENESIS berechneten XFELo. Der Strahlradius liegt innerhalb von zwei Standardabweichungen. Die Pulslängen der beiden Berechnungen stimmen im Rahmen des Fehlers überein. Mit dem Programm GENESIS und dem Propagationsprogramm kann gezeigt werden, dass ein Diamantkristall mit einer Temperatur von 50 K die eingebrachte Energie ausreichend schnell an den Rand des Kristalls abführen kann, sodass ihr Einfluss auf die Eigenschaften des XFELo-Pulses klein bleibt.

Der Einfluss auf die Verstärkung der wichtigsten Elektronenparameter und Störungen im Oszillator wurde untersucht. Die meisten der Parameter haben im Rahmen des derzeitigen erreichbaren keinen deutlichen Einfluss auf die Verstärkung eines XFELos. Den größten Einfluss auf die Verstärkung hat der Oberflächenfehler der Optiken im streifenden Einfall. Aufgrund des derzeitigen Modells des Oberflächenfehlers und der Untersuchung des Einflusses des ersten fokussierenden Spiegels lässt sich das Ergebnis schwer quantifizieren. Weitere Untersuchungen des Einflusses sind hier nötig. Der Einfluss der Aufstellungsfehler der Kristalle auf die Verstärkung ist geringer als eine analytische Überlegung ergab. Auch hier sollten weitere Studien durchgeführt werden, um abschließend zu klären, wie hoch die Toleranzen an die Aufstellung der Kristalle sind.

Im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte thermische Berechnungen ergaben, dass eine absorbierte Energie von etwa 2 μ J ungefähr die Grenze bildet, welche noch toleriert werden kann, um die gleiche Wellenlänge mit dem BRAGG-Kristall zu reflektieren, wie sie von BRAGG-Kristallen bei der Ausgangstemperatur reflektiert wird. Zusätzliche, den Wärmefluss hemmende Effekte durch die Verwendung dünner Kristalle bei tiefen Temperaturen, lassen nur kleinere absorbierte Energiemengen zu. Die spontane Undulatorstrahlung ist in den thermischen Berechnungen mit berücksichtigt und hat einen weit geringeren Einfluss auf die Erwärmung des Kristalls als der XFELo-Puls, wenn die Annahme gemacht wird, dass nur die erste Undulatorharmonische betrachtet werden muss und eine Blende einen Teil der Strahlung vom Kristall abschirmt. Kleinere Ladungen der Elektronenpakete verringern die Wärmelast. Aus den thermischen Berechnungen folgt, dass die Temperatur der Diamantkristalle auf etwa 50 K abgesenkt werden muss, um die absorbierte Energie der XFELo-Pulse ausreichend schnell abführen zu können.

Um diese thermischen Berechnung experimentell zu überprüfen, ist ein Experiment geplant und teilweise umgesetzt worden (Lieferverzögerungen haben keine abschließende Messungen erlaubt). Die absorbierte Energie der XFELo-Pulse mit deren zeitlicher Struktur wird mit einem Laser simuliert, dessen Wellenlänge so eingestellt ist, dass die Eindringtiefe des Laserlichts der Eindringtiefe der RÖNTGEN-Strahlung im Bereich der BRAGG-Reflexion entspricht. Mit diesem experimentellen Aufbau ist es möglich, Änderungen der Gitterkonstanten zu messen, die bei den Temperaturänderungen, die numerisch berechnet worden sind, auftreten werden, um den Sachverhalt der Höhe der Wärmelast in den Kristallen zu beurteilen. Die Messergebnisse

der Winkelabhängigkeit der BRAGG-Reflexion des derzeitigen Aufbaus und eine Simulation des Experiments liefern gute Übereinstimmungen. Die nächsten Schritte, die beim dem experimentellen Aufbau durchgeführt werden müssen, sind die Implementierung des Lasersystems.

Weitere technische Entwicklungen im Bereich der Kristallhalterung für kryogenisch gekühlte Kristalle, die extrem vibrationsarm sind, um die Aufstellungstoleranzen zu erfüllen, müssen umgesetzt werden. Die Untersuchung geeigneter fokussierender Optiken im streifenden Einfall wurde in dieser Arbeit nur oberflächlich untersucht und es bedarf hier einer tiefgründigeren Untersuchung in Bezug auf Oberflächenfehler, auch im Hinblick auf die thermische Last auf den Spiegeln.

Für eine Umsetzung eines durchstimmbaren XFELs muss ein hochpräzises Verfahren zur Positionierung der Kristalle geplant werden und eine geeignete Vakuumkammer konstruiert werden.

Die konstruktive Arbeit zur Umsetzung eines XFELs beim European XFEL ist bisher nicht umgesetzt worden. Physikalische Untersuchungen haben gezeigt, dass es bisher keine prinzipiellen Hindernisse gibt, die einer Umsetzung eines XFELs im Wege stehen.

A. European XFEL

Der European XFEL ist ein Linearbeschleuniger mit anschließendem FEL mit einer Gesamtlänge von ca. 3.4 km, der unterirdisch in einem Tunnel von 5.2 m bzw. 4.6 m Durchmesser vom DESY-Gelände bis nach Schenefeld, Schleswig-Holstein, verläuft. Nach dem 1.6 km langen Linenarbeschleuniger beträgt die Energie der Elektronen maximal $E_B = 17.5$ GeV. Danach schließt sich ein Tunnelfächer an, in dem die Elektronen in Undulatoren Lichtpulse erzeugen und zu den Experimentierplätzen geleitet werden. Im Folgenden werden die einzelnen Teilbereiche des Beschleunigers näher erläutert.

A.1. Injektor

Der Photoinjektor des European XFELs besteht aus einer Cs₂Te-Kathode in einer $1\frac{1}{2}$ -zelligen normalleitenden Beschleunigungsstruktur aus Kupfer. Die Energie der Elektronen wird in der Beschleunigungsstruktur, welche einen Feldgradienten an der Kathode von etwa 60 MV/m hat, auf $E_B = 5$ MeV erhöht. Ein frequenzvervierfacher Nd:YLF-Laser mit einer Wellenlänge von 262 nm, der auf die Kathode geleitet wird, erzeugt die Elektronenpakete. Der Lichtpuls von etwa 20 ps Länge löst eine ungefähr ebenso lange Elektronenwolke aus der Cs₂Te-Kathode. Ein Solenoidmagnet dient zur Fokussierung des Elektronenstrahls in das erste Beschleunigungsmodul. Ein weiterer Solenoidmagnet „Bucking Coil“ vor der Kathode dient zur Kompensation des Magnetfeldes auf der Kathode. Die Parameter der Elektronen aus dem Injektor sind in Tab. A.1 für unterschiedliche Ladungen aufgelistet (RIMJAE *et al.*, 2010).

A.2. Linearbeschleuniger

Die Elektronen aus dem Injektor mit einer Energie von $E_B = 5$ MeV werden in dem 1.6 km langen supraleitenden **Linear Accelerator** (Linac) auf eine Maximalenergie von $E_B = 17.5$ GeV beschleunigt. Dieser Linac basiert auf 9-zelligen **TeV-Energy Superconducting Linear Accelerator** (TESLA)-Strukturen (AUNE *et al.*, 2000).

Ein Elektronenpaket mit dem nötigen Spitzenstrom am Injektor zu erzeugen, ist nicht möglich, da die repulsive Raumladungskraft (COULOMB-Abstoßung) zu einer Defokussierung des Pulses führt. Im Fall relativistischer Elektronen wird die repulsive Raumladungskraft fast vollständig von der fokussierend wirkenden, magnetischen Wechselwirkung kompensiert (HINTERBERGER, 2008, S. 364). Der Elektronenstrahl kann, wenn die Strahlenergie erhöht wird, stärker komprimiert werden, ohne dass Raumladungskräfte den Elektronenpuls defokussieren. An drei Positionen im Linac, bei einer Elektronenenergie von 100 MeV, 500 MeV und 2.0 GeV, wird in dispersiven Schikanen der Elektronenpuls longitudinal komprimiert. Durch die longitudinale Kompression des Elektronenpakets wird der Spitzenstrom auf ca. $I_P = 5$ kA erhöht.

Ein Dauerpulsbetrieb bei einer Elektronenenergie von 6-8 GeV wäre möglich, da der Beschleunigungsgradient geringer sein kann und somit die Kühlleistung und die benötigte Hochfre-

Tabelle A.1.: Übersicht der Design-Strahlparameter des European XFELs nach dem Injektor bzw. Linac für verschiedene Ladungen (ZAGOROTNOV, 2011).

nach dem Injektor:						
Elektronenpaketladung (pC)	q	20	100	250	500	1000
projizierte Emittanz (mm mrad)	$\varepsilon_{\text{Proj}}$	0.1	0.3	0.6	0.7	1.0
Emittanz (Scheibe) (mm mrad)	$\varepsilon_{\text{Slice}}$	0.09	0.21	0.3	0.5	0.8
Pulslänge (ps)	t_B	17.0	17.0	20.0	22.0	25.0
Spitzenstrom (A)	I_P	1.2	5.7	13.5	24.0	43.0
Nach dem Linac:						
Kompression		3833	877	363	233	114
Spitzenstrom (kA)	I_P	4.6	5.0	4.9	5.6	4.9
Pulslänge (fs)	t_B	2.2	12.0	39.0	72.0	178
projizierte Emittanz (mm mrad)	$\varepsilon_{\text{Proj}}$	0.26	0.84	1.5	2.2	3.5
Emittanz (Scheibe) (mm mrad)	$\varepsilon_{\text{Slice}}$	0.17	0.3	0.5	0.7	1.0
Energieabweichung (Scheibe) (MeV)	σ_{E_B}	0.8	0.6	0.6	0.44	0.45

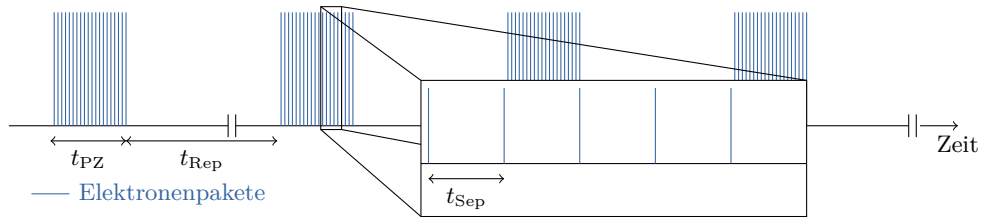


Abbildung A.1.: Füllmuster der Elektronenpakete des European XFELs.

quenzleistung geringer wäre. Bei höheren Elektronenenergien und damit verbundenen höheren Beschleunigungsgradienten ist die entstehende Wärmelast, hervorgerufen durch das Hochfrequenzfeld (HF-Feld), in den kryogenisch gekühlten Beschleunigermodulen entsprechend größer. Die Kühlleistung und HF-Leistung müssten für diesen Betrieb ausgelegt sein, welches die Bau- und Betriebskosten erhöhen würden.

Aus diesem Grund wird der European XFEL in einem Salvenmodus („burst-mode“) betrieben. Die Beschleunigungsmodule werden mit einer Rate von $f_{\text{Rep}} = 10 \text{ Hz}$ für $t_{\text{PZ}} = 0.6 \text{ ms}$ mit dem Hochfrequenzfeld gefüllt, in der maximal 2700 Elektronenpakete mit einer Repetitionsrate von $f_{\text{Sep}} = 4.5 \text{ MHz}$ beschleunigt werden können. Es lassen sich auch andere Füllmuster erzeugen, wie z.B. Einzelpulse und Pulse mit unterschiedlichem zeitlichen Abstand (siehe Abb. A.1).

A.3. Strahl-Verteilungssystem

Fünf Photonenstrahlführungen (bis zu 1.2 km lang) sind in der ersten Ausbaustufe geplant. Eine Erweiterung, um einen weiteren Fächer mit fünf Experimentierplätzen bereitzustellen, ist für

den European XFEL geplant. Die Elektronenpulszüge werden mit Hilfe eines schnell schaltbaren Ablenkmagneten in die zwei entsprechenden Tunnelabschnitte gelenkt (siehe Abb. A.2). Die Zeitabstände zwischen den Elektronenpaketen sind unterschiedlich wählbar, sodass einzelne Teile des Pulszugs in die Tunnelabschnitte, in denen der SASE 1- bzw. SASE 2-Undulator steht, abgelenkt werden können.

Drei weitere Tunnelabschnitte können über Ablenkmagnete mit Elektronenpaketen versorgt werden, nachdem sie den SASE 1- bzw. SASE 2-Undulator durchlaufen haben.

Zum jetzigen Planungsstand wird in einem dritten Tunnelabschnitt hinter dem SASE 1-Undulator der vorgesehene SASE 3-Undulator aufgestellt werden. Die beiden anderen Tunnelabschnitte werden zunächst, nicht wie geplant, mit den Undulatoren für extrem harte Röntgenstrahlung ausgestattet. Diese Tunnelabschnitte stellen einen möglichen Standort für ein XFEL-Experiment am European XFEL dar.

A.4. Undulatoren

Wie oben erwähnt, werden drei der fünf möglichen Photonstrahlröhren mit Undulatoren ausgerüstet. Nachstehend werden die drei Undulatoren und die Eigenschaften der darin erzeugten Lichtpulse beschrieben (Abb. A.2), Tab. A.2).

Der SASE 1-Undulator wird Lichtpulse mit der Wellenlänge von 0.1 nm erzeugen. Nach jetzigem Stand (2012) ist es nicht geplant, die Wellenlänge am SASE 1-Undulator durchzustimmen. Die Länge des Undulators ist 201.3 m, davon sind 46 m Zwischenabschnitte für die Elektronenstrahlführung geplant. Der SASE 2-Undulator ist 256.2 m lang und wird Lichtpulse mit Wellenlängen zwischen 0.1 nm und 0.4 nm erzeugen (magnetische Länge ~ 175 m). Der SASE 3-Undulator, der hinter dem SASE 1-Undulator stehen wird, erzeugt Wellenlängen zwischen 0.4 nm und 1.6 nm und ist 128.1 m lang. In Tab. A.2 sind die Parameter der Undulatoren zusammengefasst.

A.5. Photonstrahlführungen

Die Photonenstrahlführungen verlaufen vom Ende der Undulatoren zum Experimentiergebiet in Schenefeld. Diese Strahlführungen sind zwischen 295 m (U2) und 960 m (SASE 1) lang. In den Strahlführungen sind Monochromatoren und fokussierende Elemente untergebracht. Der Monochromator für das Licht aus dem SASE 1-Undulator steht etwa 500 m bzw. für den SASE 3-Undulator 250 m nach dem Undulatorende.

Oberhalb von 30 eV kommen Optiken im streifenden Einfall und optische Gitter zum Einsatz um kurzwelliges Licht abzulenken und zu fokussieren.

Für Röntgenstrahlung von 1 Å ist der kritische Winkel θ_{Krit} in der Größenordnung von $\theta_{\text{Krit}} \approx 1 - 5$ mrad, unterhalb dem Winkel Totalreflexion auftritt und Optiken im streifenden Einfall angewendet werden. Durch den kleinen Einfallswinkel zur Oberfläche wird der Strahlfleck um $1/\sin(\theta_{\text{In}})$ vergrößert. Für intensive Lichtpulse ist die Reduzierung der absorbierten Energiedichte des Lichts durch die Vergrößerung des Strahlflecks nötig, um Verformungen oder gar Oberflächenbeschädigungen zu vermeiden. Verformungen der Oberfläche führen zu unerwünschten Abbildungsfehlern.

Tabelle A.2.: Undulatorparameter der SASE Undulatoren des European XFELs (ALTARELLI *et al.*, 2007)

Undulator		λ_{Rad} (nm)	λ_{U} (mm)	K	L_{U} (m)		
SASE 1		0.1	35.6	3.3	201.3		
SASE 2		0.1 – 0.4	48.0	2.8 – 6.1	256.2		
SASE 3		0.4 – 4.9	80.0	3.3 – 6.8	128.1		
		SASE 1	SASE2	SASE3			
E_B	GeV	17.5	17.5	17.5	17.5	17.5	10.0
λ_{Rad}	nm	0.1	0.1	0.4	0.4	1.6	4.9
E_{Phot}	keV	12.4	12.4	3.1	3.1	0.8	0.25
P_{Peak}	GW	20	20	80	80	130	150
P_{Avg}	W	65	65	260	260	420	490
d_{Rad}	μm	70	85	55	60	70	90
θ_{Rad}	μrad	1	0.84	3.4	3.4	11.4	18
τ_{Koh}	fs	0.2	0.22	0.38	0.34	0.88	1.4
$\frac{\Delta\omega}{\omega}$	%	0.08	0.08	0.18	0.2	0.3	0.65
t_{Phot}	fs	100	100	100	100	100	100
N_{Ph}		10^{12}	10^{12}	$1.6 \cdot 10^{13}$	$1.6 \cdot 10^{13}$	$1.0 \cdot 10^{14}$	$3.7 \cdot 10^{14}$
Φ_{Avg}	s^{-1}	$3.0 \cdot 10^{16}$	$3.0 \cdot 10^{16}$	$4.8 \cdot 10^{17}$	$4.8 \cdot 10^{17}$	$3.1 \cdot 10^{18}$	$1.1 \cdot 10^{19}$
PB	B	$5.0 \cdot 10^{33}$	$5.0 \cdot 10^{33}$	$2.2 \cdot 10^{33}$	$2.0 \cdot 10^{33}$	$5.0 \cdot 10^{32}$	$1.0 \cdot 10^{32}$
AB	B	$1.6 \cdot 10^{25}$	$1.6 \cdot 10^{25}$	$6.5 \cdot 10^{24}$	$5.9 \cdot 10^{24}$	$1.4 \cdot 10^{24}$	$2.8 \cdot 10^{23}$

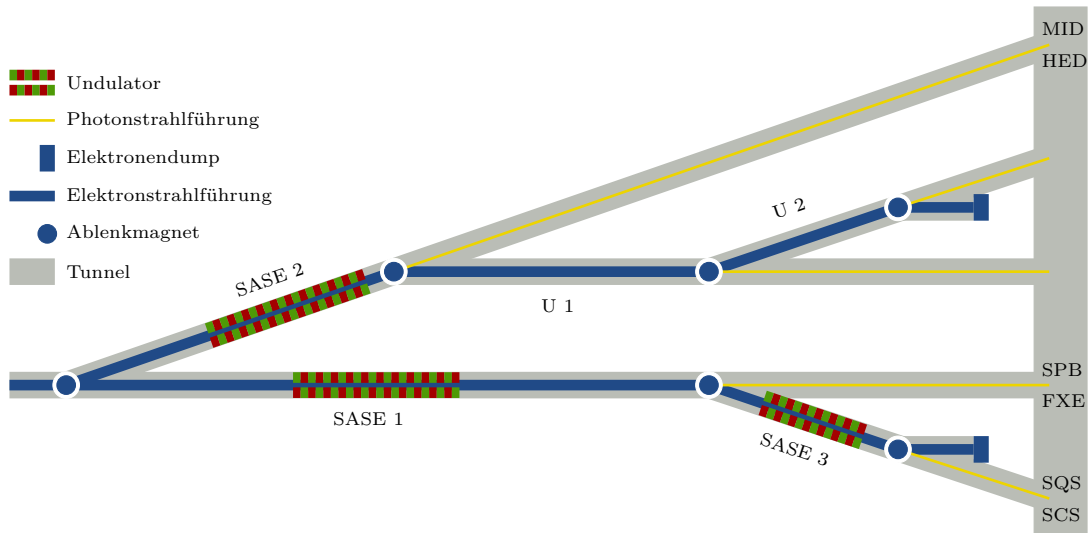


Abbildung A.2.: Schematische Darstellung des Strahlfächers vom European XFEL.

A.6. Instrumentation und Experimentierhalle

Hinter den drei Undulatoren werden sechs unterschiedliche Experimente lokalisiert sein. An der Strahlführung nach dem SASE 1-Undulator wird ein Experiment zur Untersuchung einzelner Partikel, Cluster und Biomoleküle (SPB) sowie ein weiteres für Anrege-Abtast-Experimente mit Femtosekunden-Genauigkeit aufgebaut. Mit den Röntgenlichtpulsen aus SASE 2 werden Experimente zur bildlichen Darstellung von Materialien (MID) und Experimente mit hoher Energiedichte an Materie (HED) durchgeführt. Am SASE 3-Undulator werden mit den Lichtpulsen kleine Quantensysteme (SQS) untersucht und Spektroskopie sowie kohärente Streuversuche (SCS) durchgeführt.

B. Betafunktion

Die Bewegungsgleichung der Teilchenbahn eines Elektron in einer transversalen Dimension ist gegeben durch (LEE, 1999)

$$x''(s) + \left(\frac{1}{\rho^2(s)} - k(s) \right) x(s) = \frac{1}{\rho(s)} \frac{\Delta p}{p}, \quad (\text{B.1})$$

wobei $x(s)$ der Ort des Teilchens an der Stelle s , $\rho(s)$ der Ablenkradius und $k(s)$ die Fokussierung sind. Für Teilchen ohne Impulsabweichung $\Delta p/p = 0$ kann die HILLSche Differentialgleichung mit einer cosinus-förmigen Funktion als Ansatz gelöst werden (LEE, 1999)

$$x(s) = Au(s)\cos(\Psi(s) + \phi) \quad (\text{B.2})$$

wobei eine ortsabhängige Amplitudenfunktion $u(s)$, der Betatronphase $\Psi(s)$ und einer Phase ϕ sind. Zusammen mit der Betafunktion $\beta(s) = u^2(s)$, der Emittanz eines einzelnen Teilchens ε_i und der Betatronphase $\Psi(s)$ lässt sich die Teilchenbahn beschreiben (LEE, 1999)

$$x(s) = \sqrt{\varepsilon_i} \sqrt{\beta(s)} \cos(\Psi(s) + \phi). \quad (\text{B.3})$$

Die Betatronphase lässt sich mit der Betafunktion ausdrücken

$$\Psi(s) = \int_0^s \beta(s') ds'. \quad (\text{B.4})$$

Der Phasenraum $(x(s), x'(s))$, der Beziehung zwischen Teilchensposition und Teilchenwinkel, eines Teilchens lässt sich durch drei optische Funktionen darstellen, wobei die Betatronphase eliminiert worden ist (LEE, 1999)

$$\gamma(s)x^2(s) + 2\alpha(s)x(s)x'(s) + \beta(s)x'^2(s) = \varepsilon_i, \quad (\text{B.5})$$

mit

$$\alpha(s) = -\frac{\beta'(s)}{2}$$

$$\gamma(s) = \frac{1 + \alpha^2(s)}{\beta(s)}$$

Für den vereinfachten Fall bei dem die Strahltaile bei $s = 0$ ist lässt sich die Betafunktion in Abhängigkeit vom Strahlorbit für eine Driftstrecke durch

$$\beta(s) = \frac{s^2}{\beta_0} + \beta_0 \quad (\text{B.6})$$

ausdrücken. Die mittlere Betafunktion ist dann gegeben durch

$$\beta_{\text{M}} = \frac{1}{s_{\text{max}}} \int_0^{s_{\text{max}}} \beta(s) ds. \quad (\text{B.7})$$

C. XFEL Simulationen

C.1. ERL-typischer Elektronenpuls

Nachfolgend wird eine Simulation diskutiert, die ERL-typische Elektronenparameter (LINDBERG *et al.*, 2010) zur Erzeugung des Photonenpulses als Grundlage haben. Ein ERL hat im Gegensatz zu den hoch verstärkenden FELs einen viel kleineren Spitzenstrom (ERL : $I_P \approx 10 - 100$ A; SASE FEL: $I_P \approx 2.5 - 5$ kA) (vgl. BAZAROV, 2005; ALTARELLI *et al.*, 2007). Für einen ERL liegt die Emittanz im Bereich von $2 \cdot 10^{-7}$ mrad. Um die nötige Verstärkung in einem Undulatordurchgang zu erzielen (die Verluste des Resonators auszugleichen und das erzeugte Lichtfeld zu verstärken), wird für den hier genutzten Parametersatz eine Undulatorlänge von etwa 53 m angenommen (vgl. LINDBERG *et al.*, 2010). In Tab.C.1 sind weitere Parameter der Simulation aufgelistet. Der Resonator ist aus Diamantkristallen aufgebaut. Es wird der Reflex (444) bei $E_{\text{Phot}} \approx 12$ keV genutzt. Die Auskopplung beträgt 4%.

In Abb.C.1a ist die gespeicherten Photonpulsenergie in Abhängigkeit von der Anzahl der Undulatordurchläufe des Photonpulses dargestellt. Eine fast vollständige transversale Kohärenz der Pulse in Sättigung lässt sich durch GAUSSförmige radiale Pulsverteilung erkennen (siehe Abb.C.1b). Die gespeicherte Energie steigt für die ersten 70 Durchläufe exponentiell an (maximale Verstärkung $G_{\text{max}} = 0.59$) und sättigt bei etwa $E_{\text{Sat}} = 40$ μ J. Die Abb.C.1(c)-(d) zeigt die Pulsform in der Zeit- bzw. im Frequenzdomäne. Der gesättigte Photonenpuls ist etwa $t_{\text{Phot}} = 1.40$ ps (FWHM) lang und hat eine Spitzenleistung von $P_{\text{Peak}} \approx 30$ MW. Die Kohärenzzeit ist mit $\tau_{\text{Koh}} = 940$ fs etwa ein Drittel kürzer als die Länge des Photonpulses. Die relative Bandbreite der Wellenlänge des Pulses ist etwa $\Delta\lambda/\lambda \approx 1.97 \cdot 10^{-7}$. Dies ist etwa ein Zehntel der DARWIN-Breite des genutzten BRAGG-Reflexes.

Die Spitzenbrillanz ist etwas kleiner als die eines SASE-Pulses des European XFELs. Diese hohe Spitzenbrillanz kann erreicht werden, da der die Energiebreite des Photonpulses um vier Größenordnungen kleiner ist als der SASE-Puls

$$\frac{\Delta\omega}{\omega}_{\text{SASE}} \approx 5 \cdot 10^{-3} \qquad \frac{\Delta\omega}{\omega}_{\text{XFEL}} \approx 5 \cdot 10^{-7}. \quad (\text{C.1})$$

Weitere Parameter des Photonpulses sind in Tab. C.2 zusammengefasst.

Ein Vorteil eines XFELs, der mit Elektronenpaketen mit Parametern, die einem ERL entsprechen, betrieben wird, ist die geringere Sättigungsenergie der Lichtpulse. Somit ist die thermische Last auf den Kristallen geringer. Dies liegt zu einem daran, dass die Sättigungsleistung von der Leistung des Elektronenstrahls und dem ρ_{FEL} abhängt. Zum anderen ist der Abstand zwischen Undulator und BRAGG-Kristall aufgrund des längeren Undulators größer, sodass der Lichtfleck auf den Kristallen durch die Divergenz und längere Propagation des Lichtpulses größer ist. Dies verringert die Energiedichte auf den BRAGG-Kristallen. Des Weiteren haben die Pulse einen größeren Zeitabstand, sodass eine längere Zeitspanne für den Temperatenausgleich vorhanden ist (siehe Kap. 7).

Tabelle C.1.: Parameter für die numerische Simulation eines XFELs mit ERL-typischen Elektronenpuls.

Spitzenstrom I_P	A	9.970
Normierte Emittanz ε_N	mm mrad	0.200
Elektronenenergie E_B	GeV	7.000
Relative Energieabweichung von der Resonanzenergie η		$9.990 \cdot 10^{-5}$
Korrelierte Energieabweichung ΔE_{Korr}	MeV	0.000
Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung σ_{E_B}	MeV	1.400
Elektronenpaketlänge (rms) t_B	fs	1000.
Betafunktion am Undulatoreingang $\beta_{\text{In}} = \beta_x = \beta_y$	m	80.10
Undulatorperiode λ_U	cm	1.800
Gesamtreflektivität R_{Ges}		0.902
Auskopplung		0.040
Resonatorlänge L_{Res}	m	100.0
Undulatorlänge L_U	m	53.20

Tabelle C.2.: Photonpulsparameter der numerischen Simulation eines XFELs mit ERL-typischen Elektronenpuls.

Gespeicherte Photonenenergie	μJ	$4.180 \cdot 10^{-2}$
Wellenlänge	nm	0.103
Maximale Verstärkung pro Undulatorendurchlauf		0.590
FEL-Parameter		$5.480 \cdot 10^{-5}$
Photonpulslänge (FWHM)	ps	1.400
Bandbreite (FWHM)	nm	$1.970 \cdot 10^{-8}$
Relative Bandbreite ($\Delta\lambda/\lambda$)		$1.910 \cdot 10^{-7}$
Zeit-Bandbreiten Produkt		0.794
Kohärenzzeit	fs	940.0
Kohärenzradius	μm	17.10
Spitzenbrillanz der ausgekoppelten Strahlung	B^1	$1.200 \cdot 10^{33}$
Strahltaile (Undulatormitte)	μm	18.10
Strahltaile (Kristall)	μm	92.30

¹ Photonen/s/mm²/mrad²/0.1 % Bandbreite

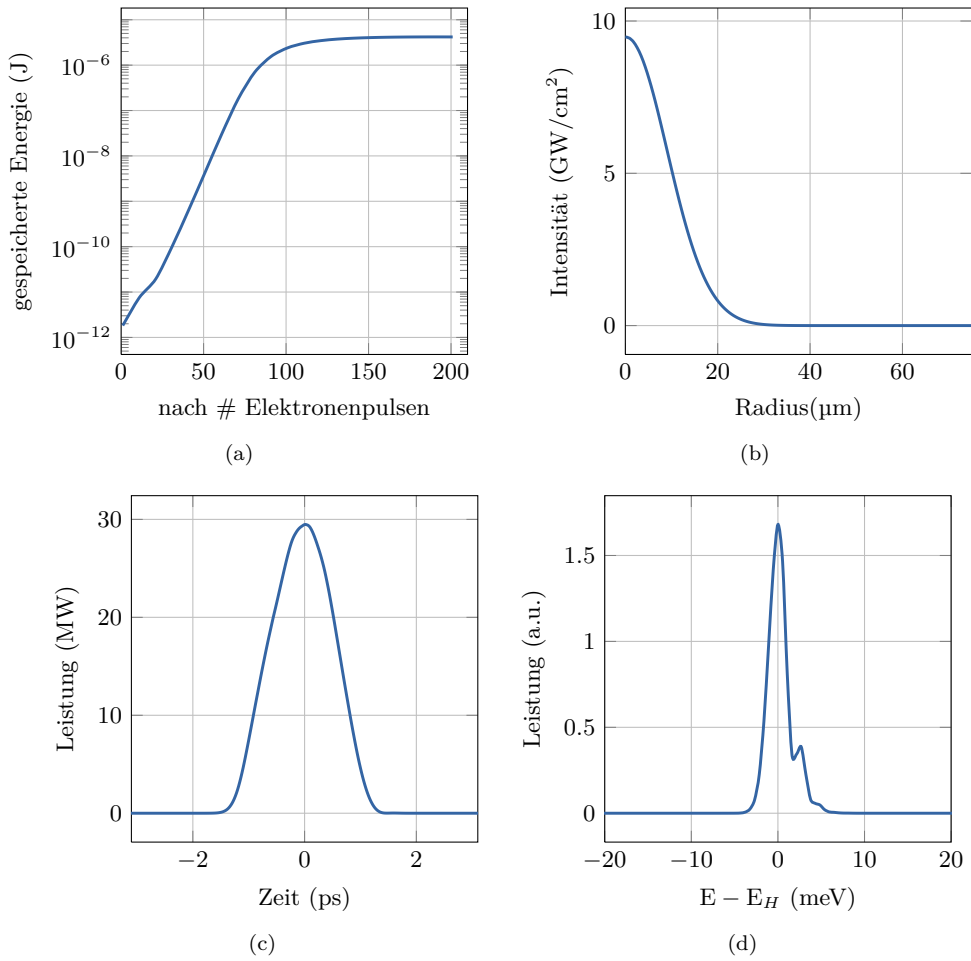


Abbildung C.1.: Numerische Simulation eines XFELs mit einem 1 ps langen ERL-typischen Elektronenpuls (LINDBERG *et al.*, 2010). (a) Gespeicherte Pulsenergie im Resonator in Abhängigkeit von der Anzahl des Undulatordurchlaufs. (b) Intensität in Abhängigkeit vom Radius in der Mitte des Undulators. (c) Gespeicherte Pulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit der Zeit. (d) Gespeicherte Pulsleistung bei Sättigung in Abhängigkeit der Frequenz.

Nachteil dieser Elektronenparameter ist, dass der Betriebszustand des European XFELs für den Betrieb des XFEL stark von dem Betriebszustand des SASE-FEL-Betriebs abweicht. Ein gleichzeitiger Betrieb von SASE-Modus und XFEL-Modus wäre nicht möglich.

D. Thermische Simulationen

D.1. Thermische Eigenschaften von Diamant und Silizium

Die wesentlichen thermischen Eigenschaften, die für die Simulation des thermischen Verhaltens der Kristalle in einem XFELo relevant sind, sind die spezifische Wärmekapazität, ein Maß für die Temperaturänderung eines Stoffes pro Joule und die Wärmeleitfähigkeit, ein Maß für den Energietransport. Diese beiden stoffspezifischen Parameter sind in Abhängigkeit von der Temperatur in Abb. D.1(b),(a) abgebildet. Für die Wärmeleitung ist die thermische Diffusion (siehe Gl. 4.10), ein Maß für die Geschwindigkeit der Temperatursausbreitung in Stoffen entscheidend. Des Weiteren ist für die Änderung der reflektierten Photonenenergie die thermische Ausdehnung des Kristalls von Bedeutung (vgl. Gl. 3.6). Diese beiden stoffspezifischen Eigenschaften sind in Abhängigkeit von der Temperatur in Abb. D.1(c),(d) dargestellt.

Diamant hat diesbezüglich die besten thermischen Eigenschaften und lässt somit Diamant als besonders geeignet erscheinen. Zum anderen hat Diamant eine sehr geringe thermische Ausdehnung (siehe Abb. D.1), die zu niedrigeren Temperaturen abnimmt und die höchste thermische Leitfähigkeit aller bekannten Stoffe, die zu kleineren Temperaturen zunimmt. Für Diamant und Silizium gibt es eine Temperatur, bei der die thermische Ausdehnung minimal wird. Das Minimum der thermischen Ausdehnung für Diamant ist bei einer Temperatur von $T \approx 50$ K. Die thermische Ausdehnung von Silizium ändert das Vorzeichen bei etwa 122 K (In der dargestellten Abb. D.1(d) durch die Farbgebung gekennzeichnet).

In Abb. D.2 ist die relative Änderung der Photonenenergie $\Delta E/E_H(T_0, \Delta T)$ in Abhängigkeit von der Temperatur des Kristalls (links Diamant, rechts Silizium) und der Temperaturänderung des Kristalls aufgetragen (vgl. Gl. 3.6). Die relative Änderung der BRAGG-Energie ist mit einer Farbskala dargestellt. Eine relative Änderung der BRAGG-Energie von 10^{-7} stellt etwa eine fünf-prozentige Änderung der Photonenenergie in Bezug auf die Bandbreite der BRAGG-Reflexion bei $E_{\text{Phot}} \approx 12$ keV eines Diamantkristalls dar. Anhand dieser Abbildung lässt sich für verschiedene Kristalltemperaturen, die relative Energieänderung in Abhängigkeit von der Temperaturänderung bestimmen.

Die Wärmeleitfähigkeit für Diamant nimmt für niedrigere Temperaturen bis 50 K zu. Die thermische Diffusion steigt für Temperaturen bis 20 – 30 K an. Aus dieser Betrachtung erscheint eine Kristalltemperatur für Diamant von etwa 50 K optimal, da bei 50 K die thermische Ausdehnung minimal ist.

D.2. Thermische Simulationen eines Diamantkristalls

In diesem Abschnitt sind thermische Simulationen eines Diamantkristalls mit einer Dicke von $100 \mu\text{m}$ für $r < 1.075$ mm bzw. $500 \mu\text{m}$ $r \geq 1.075$ mm und einem Radius von 1.5 mm für unterschiedliche T_0 dargestellt. Diese numerischen Simulationen berücksichtigen keine ballistischen Effekte.

In Abb. D.3 wird die Temperatur eines Pulszugs bestehend aus $1.8\,\mu\text{J}$ Pulsen mit einem Abstand von $222\,\text{ns}$ für eine Ausgangstemperatur von $T_0 = 300\,\text{K}$ berechnet. Der Strahlradius beträgt $171\,\mu\text{m}$. Die geringere Wärmeleitung im Vergleich zu der Wärmeleitung bei $50\,\text{K}$ führt dazu, dass selbst der geringe Temperaturanstieg eines einzelnen Pulses sich über den gesamten Pulszug sukzessive akkumuliert. Am Ende des Pulszugs beträgt der Temperaturabstieg auf der Strahlachse $(r, z) = (0, 0)$ $\Delta T \approx 20\,\text{K}$. Mit dem Ausdehnungskoeffizienten des Diamantkristalls ergibt sich eine Verschiebung der Zentralwellenlänge der BRAGG-Beugung, die dem zehnfachen der DARWIN-Breite der BRAGG-Reflexion entspricht.

Für den Fall eines Pulszugs aus $5\,\mu\text{J}$ Pulsen mit einem Strahlradius von $86\,\mu\text{m}$ (siehe Abb. D.4) beträgt der Temperaturanstieg auf der Strahlachse $(r, z) = (0, 0)$ nach $t = 600\,\mu\text{s}$ etwa $\Delta T \approx 90\,\text{K}$. Die Temperaturentwicklung eines Diamantkristalls mit einer Temperatur von $T_0 = 100\,\text{K}$ ist in Abb. D.5 dargestellt. Die Parameter sind, die in Abb. D.4 genutzt worden sind. Der Temperaturanstieg ist aufgrund der geringeren spezifischen Wärmekapazität höher als bei $T_0 = 300\,\text{K}$. Die Temperaturabnahme ist aufgrund der höheren Diffusion schneller als bei $T_0 = 300\,\text{K}$. Nach etwa $t = 10\,\mu\text{s}$ stellt sich eine Equilibriumstemperatur ein mit einer Temperaturdifferenz von $\Delta T \approx 10\,\text{K}$ zur Ausgangstemperatur. Dieser Temperaturanstieg wird aufgrund der in dieser Berechnung nicht berücksichtigten ballistischen Effekte (vgl. Abb. 7.2) noch höher sein.

Die Abb. D.6 zeigt die Temperatur in einem Diamantkristall für eine Temperatur von $T_0 = 75\,\text{K}$. Der maximale Temperatur ist vergleichbar mit der bei $T_0 = 100\,\text{K}$. Durch die noch höhere Wärmeleitung bei $T_0 = 75\,\text{K}$ nimmt die Temperatur schneller ab. Nach etwa $t = 10\,\mu\text{s}$ beträgt die Temperaturdifferenz $\Delta T \approx 5\,\text{K}$. Auch hier wurden die ballistischen Effekte vernachlässigt. Die Ballistischen Effekte sind aufgrund der größeren mittleren freien Weglänge bei $T_0 = 75\,\text{K}$ stärker als bei $100\,\text{K}$. Somit wird der Einfluss der ballistischen Effekte auf die Temperaturänderung größer sein.

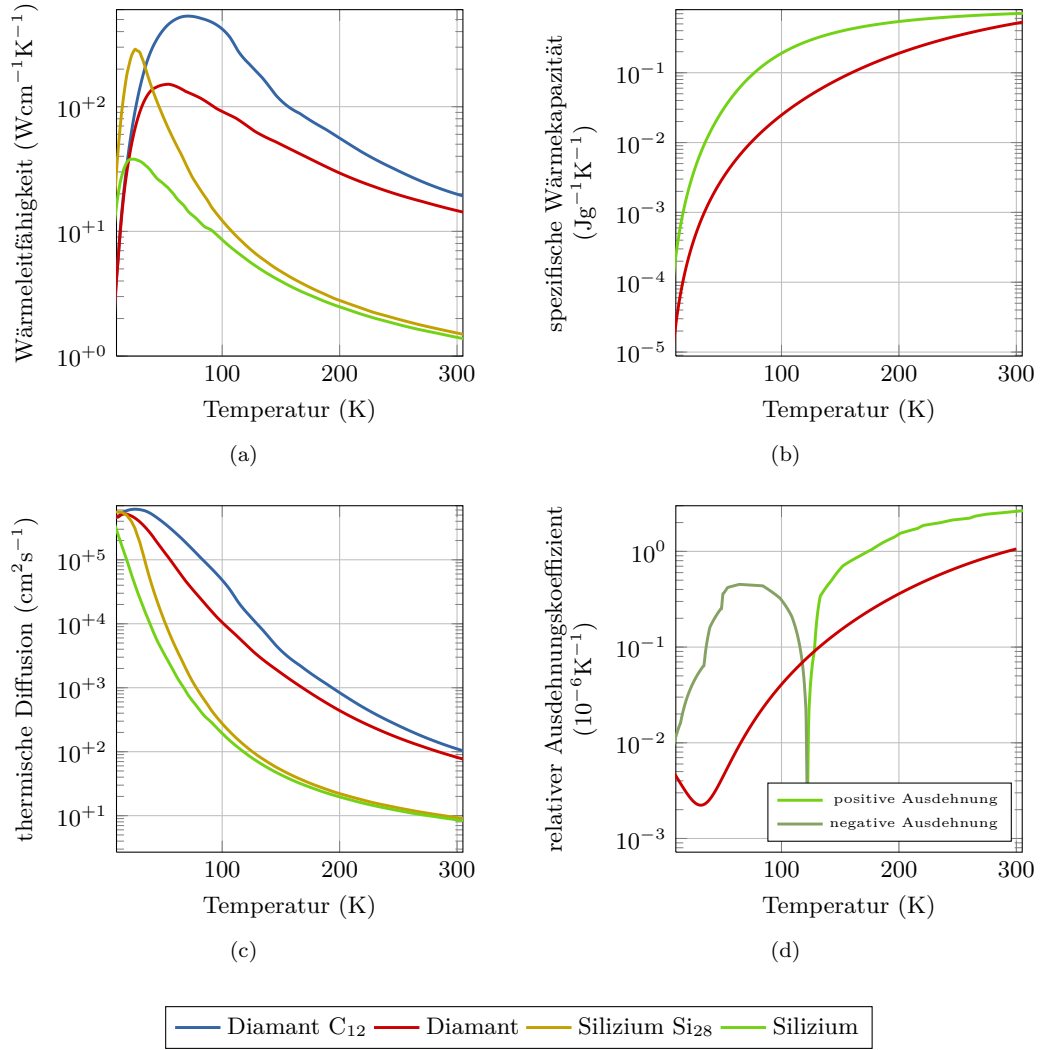


Abbildung D.1.: Thermische Eigenschaften von Silizium und Diamant. (b) Spezifische Wärmekapazität in Abhängigkeit von der Temperatur (FLUBACHER *et al.*, 1959; DESORBO, 1953). (a) Thermische Leitfähigkeit in Abhängigkeit von der Temperatur (LYON *et al.*, 1977; GLASSBRENNER *et al.*, 1964; BERMAN *et al.*, 1975). (c) Thermische Diffusion in Abhängigkeit von der Temperatur. (d) Betrag des linearen thermischen Ausdehnungskoeffizienten α in Abhängigkeit von der Temperatur (SLACK *et al.*, 1975; STOUPIN *et al.*, 2010b).

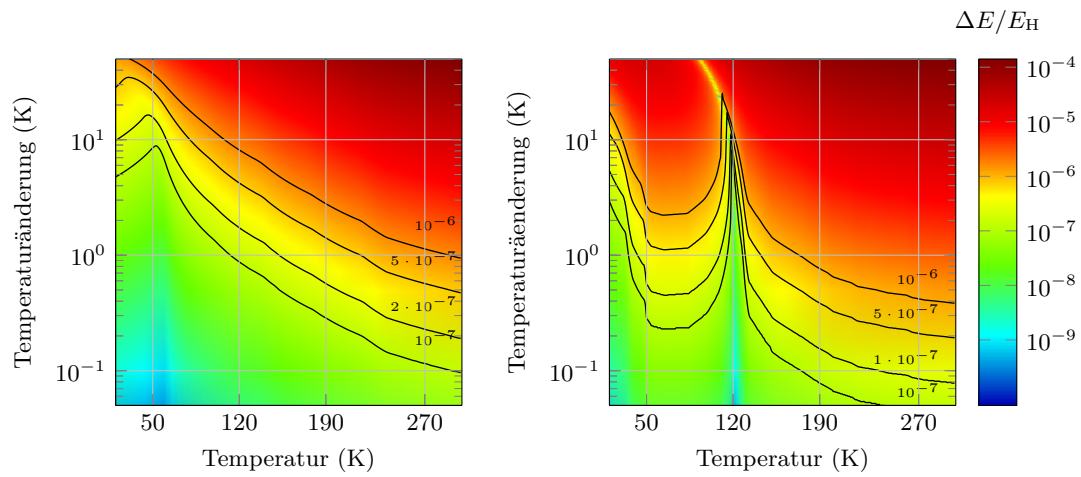


Abbildung D.2.: Relative Änderung der BRAGG-Photonenenergie in Abhängigkeit von Temperatur und Temperaturänderung für Diamant (links) und Silizium (rechts). Eingezeichnet in schwarz die Isolinien für eine Änderung der Photonenenergie von relative Änderung der BRAGG-Photonenenergie mit nebenstehender Wert.

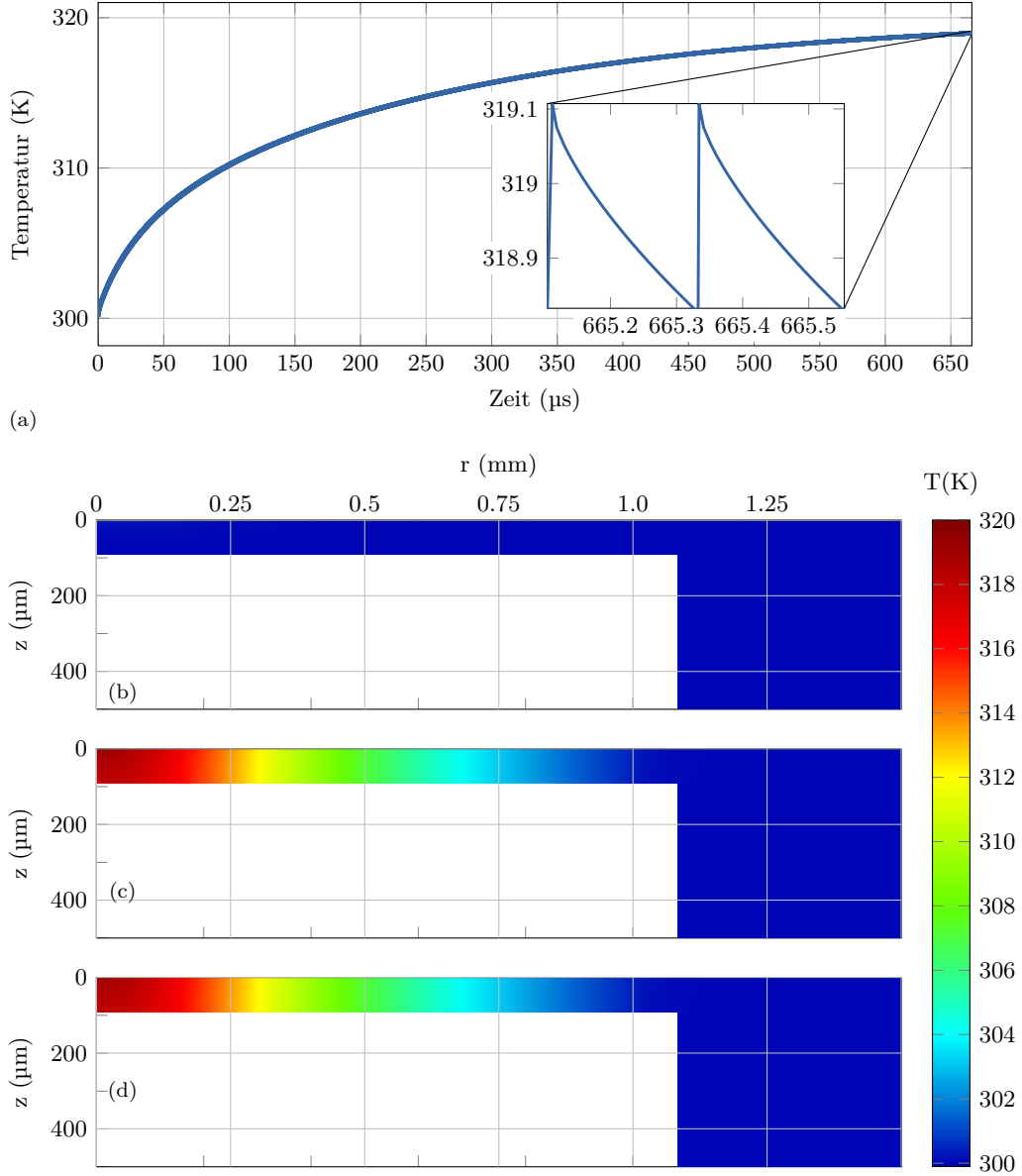


Abbildung D.3.: Temperaturverteilung und Temperaturverlauf für einen Diamantkristall mit einer Anfangstemperatur von $T_0 = 300$ K. Die absorbierte Energie beträgt $E_{\text{Abs}} = 1.8 \mu\text{J}$ und der Strahlradius $\sigma_R = 171 \mu\text{m}$. (a) Zeitlicher Temperaturverlauf am Punkt $(r, z) = (0, 0)$ für den Beginn und (b) am Ende des simulierten Zeitraums. (c) Temperaturverteilung im Kristall nach Absorption des ersten Pulses, (d) nach Absorption des letzten Pulses und (e) zum Ende der Simulation.

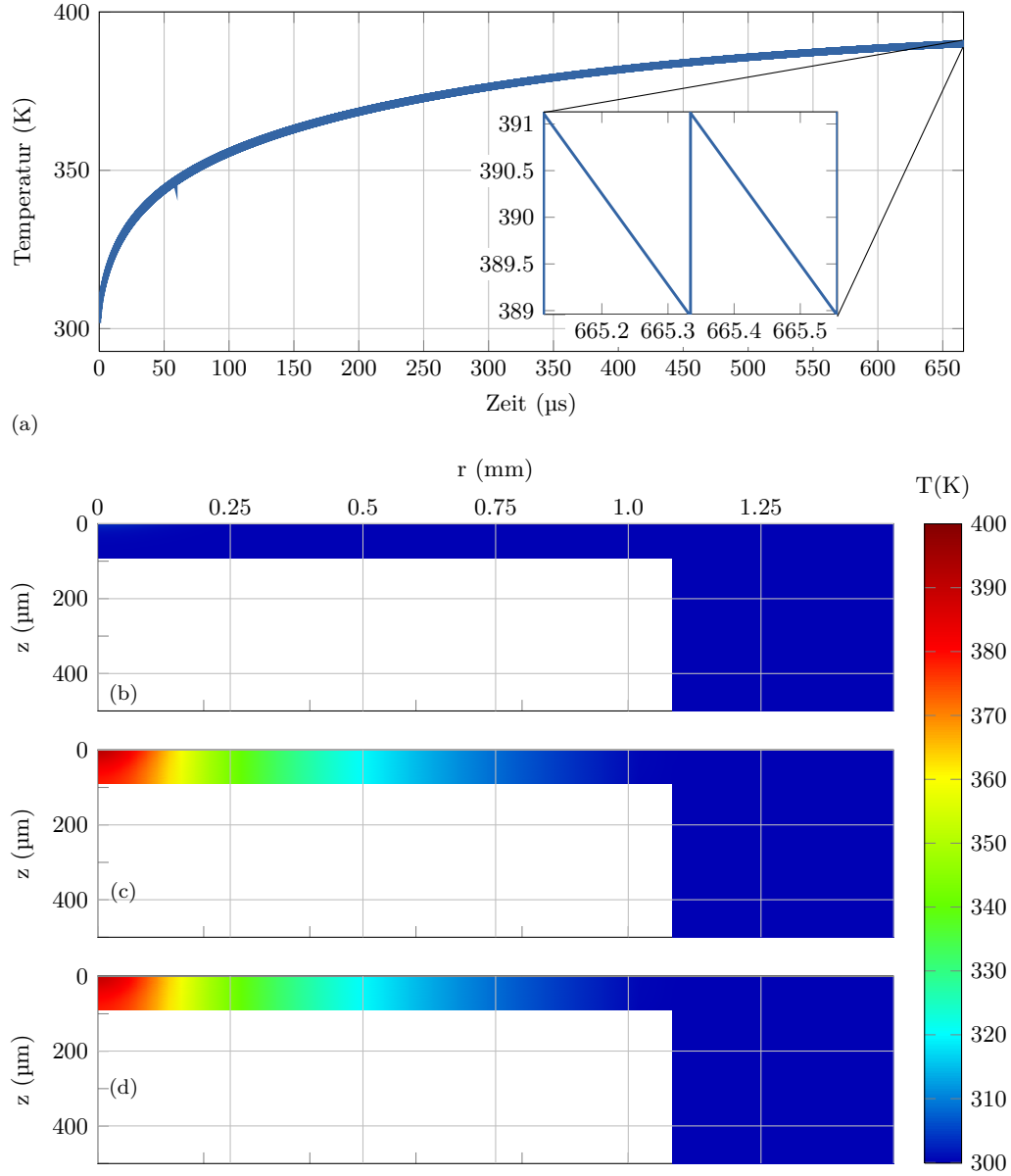


Abbildung D.4.: Temperaturverteilung und Temperaturverlauf für einen Diamantkristall mit einer Anfangstemperatur von $T_0 = 300$ K. Die absorbierte Energie beträgt $E_{\text{Abs}} = 5 \mu\text{J}$ und der Strahlradius $\sigma_R = 86 \mu\text{m}$. (a) Zeitlicher Temperaturverlauf am Punkt $(r, z) = (0, 0)$ für den Beginn und (b) am Ende des simulierten Zeitraums. (c) Temperaturverteilung im Kristall nach Absorption des ersten Pulses, (d) nach Absorption des letzten Pulses und (e) zum Ende der Simulation.

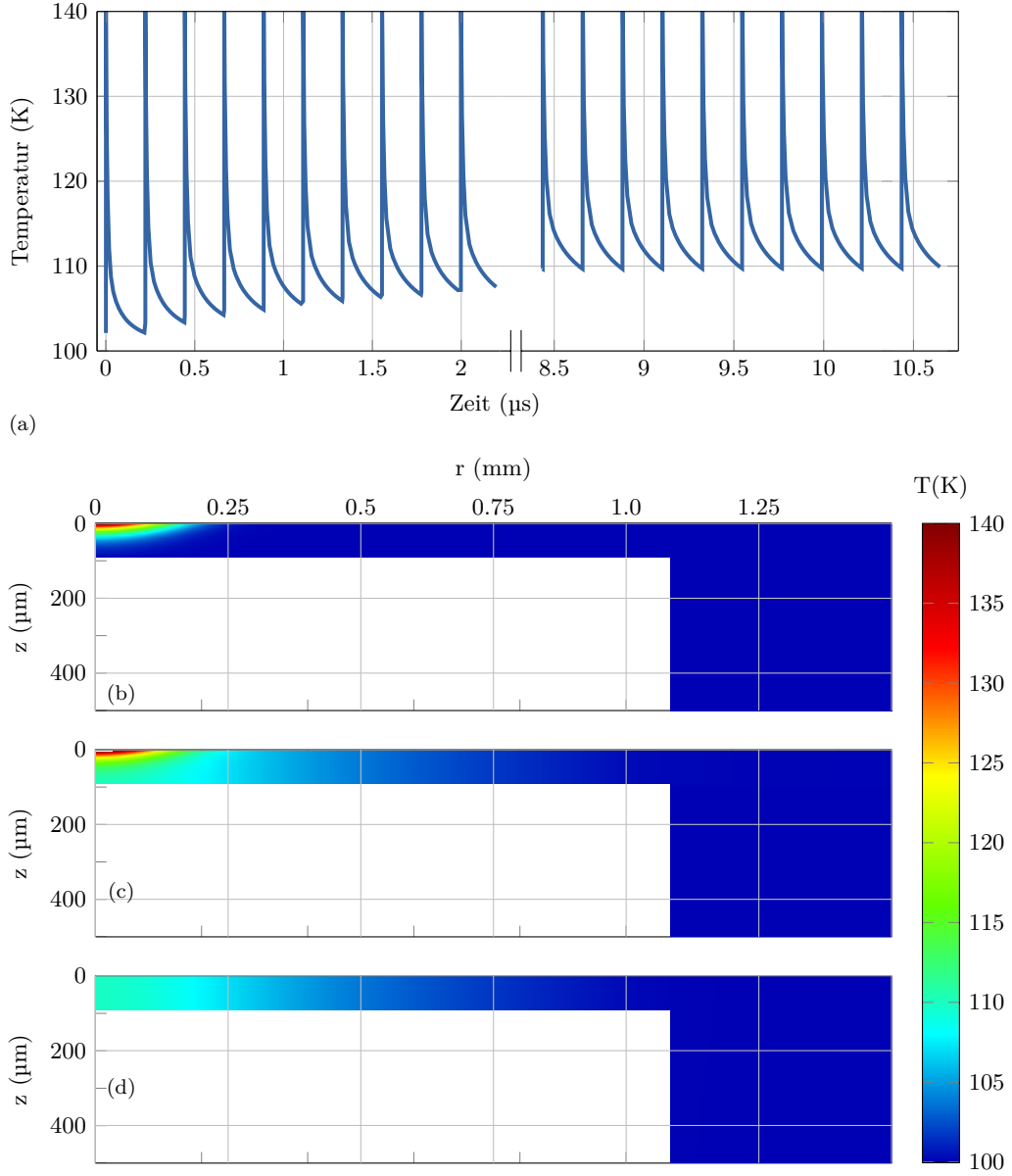


Abbildung D.5.: Temperaturverteilung und Temperaturverlauf für einen Diamantkristall mit einer Anfangstemperatur von $T_0 = 100$ K. Die absorbierte Energie beträgt $E_{\text{Abs}} = 5 \mu\text{J}$ und der Strahlradius $\sigma_R = 86 \mu\text{m}$. (a) Zeitlicher Temperaturverlauf am Punkt $(r, z) = (0, 0)$ für den Beginn und (b) am Ende des simulierten Zeitraums. (c) Temperaturverteilung im Kristall nach Absorption des ersten Pulses, (d) nach Absorption des letzten Pulses und (e) zum Ende der Simulation.

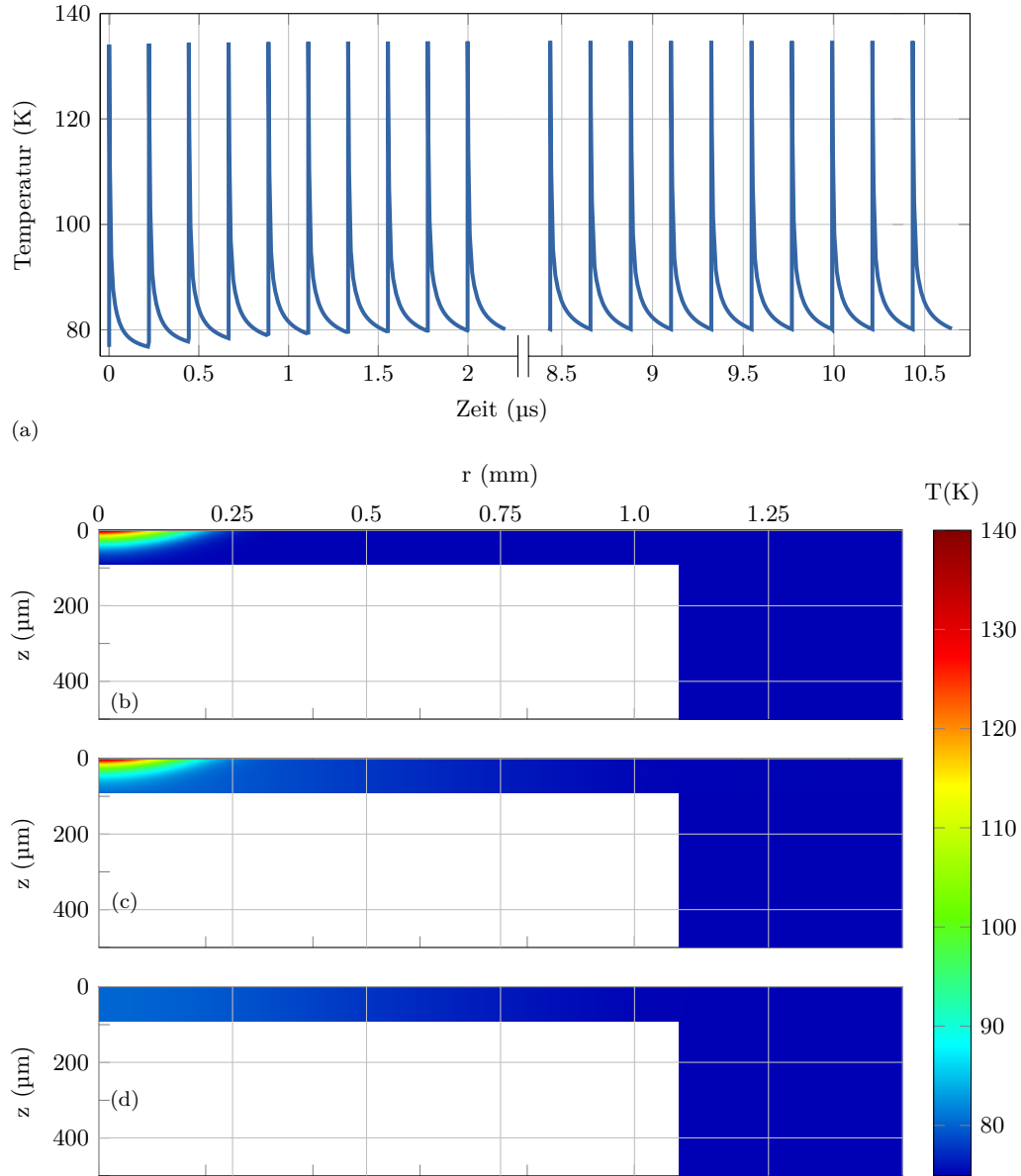


Abbildung D.6.: Temperaturverteilung und Temperaturverlauf für einen Diamantkristall mit einer Anfangstemperatur von $T_0 = 75 \text{ K}$. Die absorbierte Energie beträgt $E_{\text{Abs}} = 5 \mu\text{J}$ und der Strahlradius $\sigma_R = 86 \mu\text{m}$. (a) Zeitlicher Temperaturverlauf am Punkt $(r, z) = (0, 0)$ für den Beginn und (b) am Ende des simulierten Zeitraums. (c) Temperaturverteilung im Kristall nach Absorption des ersten Pulses, (d) nach Absorption des letzten Pulses und (e) zum Ende der Simulation.

E. Simulation des Experiments

Ein in MATHEMATICA geschriebenes Skript berechnet die erwarteten Winkelabhängigkeiten für unterschiedliche Kristallanordnungen des im Aufbau befindlichen Experiments. In Abb. 8.12 sind die berechneten und die gemessenen Intensitäten abgebildet.

Das Skript berechnet zunächst ein Ensemble aus Strahlen bestehend aus einem Vektor aus acht Einträgen mit der Photonenenergie, Ort und Winkel und einem Schalter für einen noch übrig gebliebenen Strahl. Die Energie, der Ort und der Winkel des Strahl wird innerhalb eines vorher definierten Intervalls zufällig berechnet.

In Driftstrecken breiten sich die Strahlen gradlinig aus. Trifft ein Strahl auf eine Blende, welche als eine Sprungfunktion realisiert ist, wird geprüft ob der Ort des Strahl an der Position der Blende innerhalb oder außerhalb der Apertur liegt. Entsprechend der Bedingung wird der Schalter für einen übrig gebliebenen Strahl gesetzt. Ein Spiegel ändert die Richtung der Strahlung. Dafür wird eine Spiegelebene definiert. Die Richtung des Strahls wird um den Einfallswinkel zwischen Strahl und Ebene geändert. BRAGG-Kristalle stellen in dieser Simulation einen Winkel-Filter dar, der mit einer Sprungfunktion realisiert ist. Aus der Photonenenergie des Strahls und dem Kristall z.B. Silizium und dessen Orientierung (555) wird der BRAGG-Winkel berechnet. Mit der DARWIN-Breite der BRAGG-Reflexion und dem Einfallswinkel zur Spiegelebene wird überprüft, ob der Strahl innerhalb des Winkelintervalls liegt. Entsprechend wird der Schalter gesetzt.

Abbildungsverzeichnis

2.1. Schematische Darstellung unterschiedlicher FEL-Klassen.	4
2.2. Zeitliches und spektrales Profil eines SASE-Pulses.	6
2.3. Schematische Darstellung eines planaren Undulators.	9
2.4. Undulatorspektrum in Abhängigkeit vom radialen Abstand.	11
2.5. Phasenraumdarstellung eines „schwach“ verstärkenden FELs	13
2.6. Verstärkungskurve in Abhängigkeit von der relativen Energieabweichung.	14
2.7. FEL Verstärkung für verschiedene Standardabweichung der Energieverteilung.	17
2.8. Leistung des Lichtfelds in Abhängigkeit von der Undulatorlänge.	18
3.1. Schematische Darstellung der BRAGG-Reflexion.	23
3.2. Streugeometrie der BRAGG-Beugung.	26
3.3. Reflexion in Abhängigkeit von der Photonenenergie für Diamant (4 4 4).	29
3.4. Reflektivität für Diamantkristalle unterschiedlicher MILLERSchen Indizes.	30
3.5. Eindringtiefe in Abhängigkeit von der Photonenenergie für Diamant (4 4 4)	32
4.1. Analytische Lösung des Temperaturverlaufs eines Diamantkristalls mit $T_0 = 50$ K.	37
4.2. Analytische Lösung des Temperaturverlaufs eines Diamantkristalls mit $T_0 = 300$ K.	38
4.3. Ablauf des Programms zur Berechnung des Wärmeflusses	39
4.4. Schematische Darstellung des Kristalls der thermischen Simulation.	40
5.1. Resonator mit zwei gekrümmten Kristallen	46
5.2. Resonator mit zwei Kristallen und einem fokussierenden Element	49
5.3. Resonator mit zwei Kristallen und zwei fokussierenden Element	50
5.4. Resonator mit vier Kristallen und zwei fokussierenden Element	52
5.5. Betafunktion zur Einkopplung in den Resonator	53
5.6. Phasenraumellipsen von der Schikane und dem Undulator.	53
6.1. Ablauf der Simulation eines XFELs mit GENESIS.	58
6.2. Numerische Simulation eines XFELs mit 1 nC Elektronenpaketen.	62
6.3. Verstärkung in Abhängigkeit von der relativen Energieabweichung.	64
6.4. Numerische Simulation eines XFELs mit 1 nC Elektronenpaketen.	66
6.5. Numerische Simulation eines XFELs unter Berücksichtigung der Wärmelast.	68
6.6. Temperatur der BRAGG-Kristalle in Abhängigkeit vom Undulatordurchlauf.	70
6.7. Numerische Simulation eines XFELs mit einer Ladung von 100 pC.	73
6.8. Numerische Simulation eines XFELs für unterschiedliche Wellenlängen.	75
6.9. Verstärkung bzgl. einer Energiekorrelation und eines unkorrelierten Energiefehlers.	77
6.10. Abhängigkeit der Verstärkung bzgl. eines Puls-zu-Puls Energiefehlers.	78
6.11. Abhängigkeit der Verstärkung bezüglich der Strahlblage und des Strahlwinkels.	80

6.12. Abhängigkeit der Verstärkung bzgl. Wellenfrontstörungen	81
7.1. Integrierte abgestrahlte Leistung der spontanen Undulatorstrahlung.	84
7.2. Temperaturentwicklung eines Diamantkristalls nach Absorption eines Pulszugs. .	85
7.3. Temperaturentwicklung eines Diamantkristalls nach Absorption eines Pulszugs. .	86
7.4. Temperaturverteilung und Temperaturverlauf eines dünnen Kristalls.	90
7.5. Temperaturverteilung und Temperaturverlauf eines dicken Kristalls.	91
7.6. Temperaturentwicklung hervorgerufen durch Undulatorstrahlung (1 nC).	92
7.7. Temperaturentwicklung hervorgerufen durch Undulator- und XFEL-Strahlung. .	93
7.8. Temperaturentwicklung hervorgerufen durch Undulatorstrahlung (100 pC). . . .	94
7.9. Temperaturentwicklung hervorgerufen durch unterschiedliche lange Anregungen. .	94
8.1. Absorptionlänge von Diamant und Silizium im UV bzw. NIR.	96
8.2. Schematischer Aufbau des Strahlfächers C am DORIS	97
8.3. Schematischer Aufbau des experimentellen Aufbaus mit zwei Kristallen.	98
8.4. Schematischer Aufbau des experimentellen Aufbaus	99
8.5. CAD-Darstellung des Experiments.	100
8.6. CAD-Ansichten des Aufbaus des kryogenisch gekühlten Kristalls.	102
8.7. Messung der Temperatur des Kristallhalters.	103
8.8. Schematische Darstellung der Laserpulse und RÖNTGEN-Lichtpulse.	106
8.9. Darstellung des optischen Wegs zwischen Laser und Kristall	107
8.10. DUMOND-Diagramm für Kristallanordnung im Experiment.	109
8.11. Theoretische Signaländerung des Experiments.	110
8.12. Messung der Winkelabhängigkeit des Experiments für Si (555)	111
A.1. Füllmuster der Elektronenpakete des European XFELs.	118
A.2. Schematische Darstellung des Strahlfächers vom European XFEL	120
C.1. Numerische Simulation eines XFELs langen ERL-typischen Elektronenpulsen. .	127
D.1. Thermische Eigenschaften von Silizium und Diamant.	131
D.2. Änderung der Photonenenergie in Abhängigkeit von Temperaturänderung	132
D.3. Temperaturverteilung und Temperaturverlauf für Diamant bei $T_0 = 300$ K. . . .	133
D.4. Temperaturverteilung und Temperaturverlauf für Diamant bei $T_0 = 300$ K. . . .	134
D.5. Temperaturverteilung und Temperaturverlauf für Diamant bei $T_0 = 100$ K. . . .	135
D.6. Temperaturverteilung und Temperaturverlauf für Diamant bei $T_0 = 75$ K. . . .	136

Tabellenverzeichnis

2.1. Parameter für Berechnung der Verstärkung aus Abb. 2.7.	18
3.1. Wellenlängen der BRAGG-Beugung.	30
4.1. Parameter zur analytische Berechnung der Temperaturentwicklung.	37
5.1. Parameter für einen Resonator mit zwei gekrümmten Kristallen.	45
5.2. Parameter für Resonator mit zwei Kristallen und einem fokussierenden Spiegel. .	47
5.3. Parameter für Resonator mit zwei Kristallen und zwei fokussierenden Spiegel. .	48
5.4. Parameter für Resonator mit vier Kristallen und zwei fokussierenden Spiegel. .	51
6.1. Parameter für ein 75 fs langes Elektronenpaket.	61
6.2. Photonpulsp parameter eines XFELs mit maximaler Sättigungsenergie.	64
6.3. Photonpulsp parameter eines XFELs mit minimaler Sättigungsenergie.	67
6.4. Parameter für ein Elektronenpaket mit einer Ladung von 100 pC.	72
6.5. Photonpulsp parameter eines XFELs getrieben mit 5 fs langen Elektronenpaketes. 74	
7.1. Parameter der thermischen Simulation.	87
8.1. Parameter des C-Fächers	96
8.2. Elektronen- und Photonenparameter für einen DORIS-Ablenkmagneten.	97
8.3. Liste der genutzten Komponenten zur Justage der BRAGG-Kristalle	101
8.4. Parameter der Laserheizung.	104
A.1. Übersicht über die Strahlparameter des European XFELs.	118
A.2. Undulatorparameter der SASE-Undulatoren des European XFELs	120
C.1. Elektronparameter für eines XFELs mit ERL-typischen Elektronenpuls.	126
C.2. Photonpulsp parameter eines XFELs mit ERL-typischen Elektronenpuls.	126

Glossar

Free Elektron-Laser in Hamburg

Free Elektron-Laser in Hamburg am DESY ein FEL der Strahlungspulse mit Wellenlängen im UV bis VUV erzeugt.

Linac Coherent Light Source

Linac Coherent Light Source ist der erste FEL im harten Röntgenbereich am SLAC.

Stanford Linear Accelerator Center

Stanford Linear Accelerator Center ist ein Beschleuniger Zentrum in den USA.

TeV-Energy Superconducting Linear Accelerator-Struktur

Bezeichnet eine 9-zellige Kavität zur Beschleunigung von Elektronen. Diese Struktur besteht aus hochreinem Niob und wird bei etwa 2 K betrieben, sodass das Niob supraleitend wird. Damit ist es möglich ein sehr hohe Güte der Hohlraumresonatoren zu erreichen und somit das beschleunigende Hochfrequenzfeld lange aufrecht zu erhalten, ohne dass sich die Struktur zu stark erwärmt und die Supraleitung zusammenbricht. Die fundamentale transversale Mode der Resonatorstrukturen ist 1.3 GHz. Der mittlere Beschleunigungsgradient ist $\sim 23.6 \text{ MV m}^{-1}$, der zukünftig bis auf 28 MV m^{-1} steigen soll.

Deutsches Elektron-Synchrotron

Deutsches Elektron Synchrotron ist ein Forschungszentrum für Beschleuniger-, Hochenergiephysik und Photonenforschung der Helmholtz Gesellschaft in Hamburg und ein Beschleuniger auf dem DESY-Gelände.

Doppel-Ring-Speicher

Doppel-Ring-Speicher ist eine Synchrotronstrahlungsquelle der zweiten Generation am DESY.

Energy Recovery Linac

Energy Recovery Linac ist ein Elektronenbeschleuniger bei dem die beschleunigten Elektronen nach dem Experiment in den Beschleunigungsstrukturen wieder zurück geführt und abgebremst werden und so in den Resonatoren ein Hochfrequenzfeld erzeugen, welches zur Beschleunigung nachfolgender Elektronenpakete genutzt wird.

European XFEL

Der European XFEL ist ein sich im Bau befindlicher XFEL der am Standort DESY, der von einer internationalen Kollaboration finanziert und betrieben wird.

Freier Elektronen Laser Oszillator im Röntgenbereich

Ein X-Ray Free-Electron Laser Oscillator ist eine auf einem Elektronenbeschleuniger ba-

sierende Lichtquelle, die auf dem FEL-Prozess basiert und im Spektralbereich des RÖNTGEN-Lichts, wobei Sättigung der RÖNTGEN-Strahlung nach vielen Resonatorumläufe erzielt wird, emittiert.

Freier-Elektronen Laser

Ein **Free Electron Laser** ist Elektronenbeschleuniger-basierter Laser, der auf dem FEL-Prozess basiert.

Hohe Harmonischen Generation

hohe harmonische **Generation**

Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

Light **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation

Linear Accelerator

Ein **Linear Accelerator** ist ein Teilchenbeschleuniger der entlang einer geraden Strecke aufgebaut wird.

Self-Amplified Spontaneous Emission

Self**A**mplified **S**pontaneous **E**mission ist ein Verstärkungsprozess beim FEL.

Akronyme

AOM	A kusto- O ptischer M odulator
APD	Lawinen-Photodiode
Cr:LiSAF	C hrom dotiertes L ithium- S trontium- A luminum- F luorid
CSR	C oherent S ynchrotron R adiation
DESY	D eutsches E lektron S ynchrotron
DORIS	D oppel- R ing- S peicher
ERL	E nergy R ecovery L inac
FEL	F ree E lectron L aser
FHG	F ourth H armonic G enererator
FLASH	F ree Elektron- L aser in H amburg
GFK	glasfaserverstärkter K unststoff
HHG	H ohe- H armonische- G eneration
IDL	I nteractive D ata L anguage
LASER	L ight A mplification by S timulated E mission of R adiation
LCLS	L inac C oherent L ight S ource
Linac	L inear A ccelerator
MoStab	M onochromator s tabilisierung
Nd:YLF	N eodym dotiertes L ithium- Y ttrium- F luorid
NIR	N ear I nfrared R adiation

OPC	O ptical P ropagation C ode
SASE	S elf A mplified S pontaneous E mission
SLAC	S tanford L inear A ccelerator C enter
TESLA	T eV- E nergy S uperconducting L inear A ccelerator
Ti:Sa	T itan- S aphir
UV	U ltraviolette S trahlung
VUV	V akuum U ltraviolette S trahlung
XFEL	X - R ay F ree E lectron L aser O scillator
XOP	X -ray O riented P rograms
YAP	Y ttrium- A luminum- G ranat

Symbolverzeichnis

A	Fläche in Quadratmeter (m^2)
a	Diffusion in Meter pro Sekundenquadrat (m s^{-2})
a_0	Gitterkonstante in Meter (m)
B_0	Magnetische Flussdichte auf der Undulatorachse (T)
b_H	Asymmetrieparameter zur Berücksichtigung des Winkels zwischen Kristalloberfläche und Streuebenen im Kristall (dimensionslos)
AB	Mittlere Brillanz in Brillanz ($B = \text{Photonen/s/mm}^2/\text{mrad}^2/0.1\% \text{ Bandbreite}$)
PB	Spitzenbrillanz in Brillanz ($B = \text{Photonen/s/mm}^2/\text{mrad}^2/0.1\% \text{ Bandbreite}$)
B_y	y-Komponente des magnetischen Feldes auf der Undulatorachse (T)
C	Cosinusförmiges FRESNEL-Integral
c_0	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum in Meter pro Sekunde (m s^{-1})
C_P	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck in Joule pro Gramm pro Kelvin ($\text{J g}^{-1} \text{K}^{-1}$)
$C_{P,m}$	Über ΔT gemittelte spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck in Joule pro Gramm pro Kelvin ($\text{J g}^{-1} \text{K}^{-1}$)
C_V	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen in Joule pro Gramm pro Kelvin ($\text{J g}^{-1} \text{K}^{-1}$)
Δ_{bal}	Ballistische Korrektur zur Wärmeleitung (dimensionslos)
d_H	Abstand der Netzebene im BRAGG-Kristall in Meter (m)
$\vec{D}_H$	Vektor des elektrischen Feldes im Kristall für $\vec{k}_H$ in Volt pro Quadratmeter (V m^{-2})
$D(\omega)$	Zustandsdichte (dimensionslos)
d_{Rad}	Photonen Quellgröße FWHM in Meter (m)
$\vec{D}(\vec{r})$	Räumlicher Anteil des Vektors vom elektrischen Feld in Volt pro Quadratmeter (V m^{-2})
E	Elektrisches Feld in Volt pro Meter (V m^{-1})
e	Elementarladung in Coulomb (C)
E_0	Elektrisches Feld am Undulatoreingang in Volt pro Meter (V m^{-1})
E_{1H}	Abgestrahlte Pulsenergie der spontanen Undulatorstrahlung in der ersten Harmonischen (J)
E_{Abs}	Absorbierte Energie in Joule (J)

E_B	Elektronenenergie in Elektronenvolt (eV)
E_H	BRAGG-Energie in Elektronenvolt (eV)
$\vec{E}_i$	Amplitude des monochromatischen elektrischen Feldes im Vakuum in Volt pro Quadratmeter (V m^{-2})
E_{Phot}	Photonenenergie in Elektronenvolt (eV)
E_{Sat}	Sättigungsenergie der XFEL-Pulse in Joule (J)
E_{SUR}	Abgestrahlte Pulsenergie der spontanen Undulatorstrahlung (J)
E_x	Elektrisches Feld in x-Richtung in Volt pro Meter (V m^{-1})
$\tilde{E}_x$	Langsam varierende Amplitude des elektrischen Feldes in Volt pro Meter (V m^{-1})
F	FRESNEL-Integralkern
f	Teichenverteilungsfunktion der Phononen
f^0	Gleichgewichtsverteilungsfunktion der Phononen
f^1	Teichenverteilungsfunktion der Phononen erster Ordnung
f_{BRAGG}	DARWIN Breite der BRAGG-Reflexion in Hertz (Hz)
F_H	Strukturfaktor einer Einheitszelle des Kristalls (dimensionslos)
f_k	Teichenverteilungsfunktion der Phononen im k-Raum
f_L	Fokale Länge einer Linse in Meter (m)
f_ω	Teichenverteilungsfunktion der Phononen in Abhängigkeit von der Phononfrequenz
f_ω^0	Gleichgewichtsverteilungsfunktion der Phononen
f_{Rep}	Frequenz zweier aufeinander folgender Pulszüge in Hertz (Hz)
f_{Sep}	Frequenz zweier aufeinander folgender Pulse in Sekunden (s)
G	Verstärkung des elektrischen Feldes (dimensionslos)
g_1	normierte zeitliche Kohärenzfunktion erster Ordnung
γ_1	normierte räumliche Kohärenzfunktion erster Ordnung
G_{max}	Maximale Verstärkung pro Undulatordurchlauf (dimensionslos)
h_p	PLANCKsches Wirkungsquantum in Joule Sekunde (J s)
$\vec{H}$	Reziproker Gittervektor in pro Meter (m^{-1})
I_A	ALVEN-Strom in Ampère (A)
I_P	Spitzenstrom in Ampère (A)
J_0	Besselfunktion nullter Ordnung
$\tilde{j}_0$	DC Stromdichte in Ampère pro Quadratmeter (A m^{-2})
J_1	Besselfunktion erster Ordnung
$\tilde{j}_1$	Modulierte Stromdichte in Ampère pro Quadratmeter (A m^{-2})
K	Undulatorparameter (dimensionslos)

k	Quadrupolstärke in pro Quadratmeter (m^{-2})
$\vec{K}_0$	Einlaufender Wellenvektor im Vakuum
$\vec{k}_0$	Einlaufender Wellenvektor im Kristall
K_{Abs}	Betrag des Wellenvektors in pro Meter (m^{-1})
k_{B}	BOLTZMANN-Konstante in Joule pro Kelvin (J K^{-1})
$\vec{K}_{\text{H}}$	Gestreuter Wellenvektor im Vakuum
$\vec{k}_{\text{H}}$	Gestreuter Wellenvektor im Kristall
k_{p}	Plasmawellenzahl in pro Meter (m^{-1})
k_{Rad}	Wellenzahl der Undulatorstrahlung pro Meter (m^{-1})
k_{s}	Raumladungsparameter in pro Meter (m^{-1})
k_{U}	Undulatorwellenzahl in pro Meter (m^{-1})
$\vec{k}$	Ortsvektor im reziproken Raum
L	Dicke des Körpers senkrecht zum Wärmefluss in Meter (m)
l_{Abs}	Photoabsorptionslänge in Meter (m)
l_{Ext}	Eindringtiefe bei BRAGG-Reflexion in Meter (m)
L_{G}	3D Verstärkungslänge in Meter (m)
L_{G0}	1D Verstärkungslänge in Meter (m)
l_{mfp}	Mittlere freie Weglänge in Metern (m)
L_{Res}	Resonatorlänge in Meter (m)
L_{U}	Undulatorlänge in Meter (m)
m_0	Ruhmasse in Kilogramm (kg)
m_e	Ruhmasse des Elektrons in Kilogramm (kg)
m_{Element}	Masse einem Gitterelementes in Gramm (g)
N_e	Anzahl der Elektronen im Elektronenpaket (dimensionslos)
n_e	Elektronendichte in pro Kubikmeter (m^{-3})
N_{NE}	Anzahl der Netzebenen innerhalb der Extinktionslänge (dimensionslos)
$\vec{n}_z$	Nach innen gerichteter Normalenvektor der Kristalloberfläche
N_{Ph}	Anzahl der Photonen (dimensionslos)
N_{U}	Anzahl der Undulatorperioden λ_{U} im Undulator (dimensionslos)
P_{Avg}	Mittlere Leistung der FEL-Pulse in Watt (W)
P_{out}	Ausgangsleistung in Watt (W)
P_{Peak}	Spitzenleistung der FEL-Pulse in Watt (W)
P_{Syn}	Abgestrahlte Synchrotronstrahlungsleistung eines Teilchens im Watt (W)
Q	Wärmemenge in Joule (J)

Q_{Abs}	Absorbierte Energie in Joule (J)
Q_{Element}	Energie in einem Gitterelement in Joule (J)
$\dot{Q}$	Wärmefluss in Watt (W)
Q_{Puls}	Energie des Lichtpulses in Joule (J)
R_{B}	BRAGG-Reflektivität (dimensionslos)
$\vec{r}$	Ortsvektor
r	Ortsvektor
$r_{0\text{H}}$	BRAGG-Reflexionsamplitude (dimensionslos)
r_{Blende}	Radius der Blende in Meter (m)
r_{DM}	Ablenkradius eines Dipol in Meter (m)
r_{D}	Differenz zwischen zwei Ortsvektoren
r_{e}	Klassischer Elektronenradius in Meter (m)
R_{Ges}	Reflektivität des Resoantors für einen Umlauf (dimensionslos)
r_{innen}	Kristallradius für $z < z_{\text{innen}}$ in Meter (m)
r_{Koh}	Kohärenzradius der Photonen in Meter (m)
r_{L}	Krümmungsradius eines Spiegels in Meter (m)
$r_{\text{außen}}$	Kristallradius in Meter (m)
S	Sinusförmiges FRESNEL-Integral
σ_{x}	Strahlgröße in x-Richtung in Meter (m)
σ_{y}	Strahlgröße in y-Richtung in Meter (m)
d_{Krist}	Dicke des Kristalls in Meter (m)
T_{B}	BRAGG-Transmission (dimensionslos)
T	Temperatur in Kelvin (K)
t	Zeit in Sekunden (s)
T_0	Initiale Temperatur des Kristalls in Kelvin (K)
t_0	Zeitkonstante der Diffusion in Sekunden (s)
t_{00}	BRAGG-Transmissionsamplitude (dimensionslos)
t_{B}	Länge des Elektronenpakets in Sekunden (s)
TBP	Zeit Bandbreitenprodukt (dimensionslos)
T_{Element}	Temperatur eines Gitterelements in Kelvin (K)
T_{Equ}	Gleichgewichtstemperatur in Kelvin (K)
T_{Ext}	Externe Temperaturanregung in Kelvin (K)
T_{max}	Maximale Temperatur in Kelvin (K)
t_{Phot}	Länge des Photonenpulses in Sekunden (s)

t_{PZ}	Länge des Pulszugs in Sekunden (s)
t_{Rep}	Zeitabstand der Pulszüge in Sekunden (s)
t_{Sep}	Abstand zweier aufeinander folgender Photonpulse in Sekunden (s)
U	Innere Energie in Joule (J)
V	Volumen in Kubikmeter (m^3)
$\vec{v}$	Geschwindigkeitsvektor
$\dot{\vec{v}}$	Beschleunigungsvektor
v_{S}	Schallgeschwindigkeit in Meter pro Sekunde (m s^{-1})
v_x	Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung in Meter pro Sekunde (m s^{-1})
v_z	Longitudinale Geschwindigkeitskomponente in Meter pro Sekunde (m s^{-1})
$\bar{v}_z$	Mittlere longitudinale Geschwindigkeit in Meter pro Sekunde (m s^{-1})
W	Integralkern der Propagation
w_{H}	Korrektur zum BRAGG-Gesetz (dimensionslos)
Z	Anzahl der Elementarladungen eines Teilchens (dimensionslos)
z	Räumliche Koordinate in Meter (m)
z_{innen}	Kristalldicke $r < r_{\text{innen}}$ in Meter (m)
$z_{\text{außen}}$	Kristalldicke $r > r_{\text{innen}}$ in Meter (m)
z_{R}	RAYLEIGH-Länge in Meter (m)
α	Linearer Ausdehnungskoeffizient in pro Kelvin (K^{-1})
α_{D}	Eigenwert der Differentialgleichung dritter Ordnung für einen FEL
α_{H}	Streuparameter der BRAGGbeugung (dimensionslos)
β_0	Betafunktion bei der Strahltille in Meter (m)
β_{In}	Betafunktion am Undulatoranfang in Meter (m)
β_{M}	Mittlere Betafunktion in Meter (m)
β_{rel}	Auf c_0 normierte Geschwindigkeit (dimensionslos)
$\bar{\beta}_{\text{rel}}$	Auf c_0 normierte longitudinale Geschwindigkeit $\bar{v}_z$ (dimensionslos)
β_x	Betafunktion in x-Richtung in Meter (m)
β_y	Betafunktion in y-Richtung in Meter (m)
χ_0	FOURIERkomponete der elektrischen Suszeptibilität (dimensionslos)
χ_{H}	FOURIERkomponete der elektrischen Suszeptibilität (dimensionslos)
$\Delta a_0/a_0$	Relative Änderung der Gitterkonstante (dimensionslos)
ΔE_{Korr}	Energiekorrelation der Elektronen in z-Richtung in Elektronenvolt (eV)
ΔE_{Phot}	Energiebreite (FWHM) der Röntgenstrahlung in Elektronenvolt (eV)
Δh	Distanz zwischen idealer und tatsächlicher Oberfläche in Meter (m)

Δ_H	Impulstransfer an Vakuum-Kristall-Grenzfläche
$\Delta\lambda$	Bandbreite (rms) der Photonen in Meter (m)
$\Delta\lambda/\lambda$	Relative Bandbreite der Photonen (dimensionslos)
$\frac{\Delta\omega}{\omega}$	Relative Bandbreite der Photonen (dimensionslos)
Δq	Integrationsschritt
ΔT	Temperaturänderung in Kelvin (K)
ΔT	Temperaturänderung des Kristalls in Kelvin (K)
$\Delta\theta_x$	Winkelfehler einer optischen Komponente in Radiant (rad)
ϵ_0	Permittivität im Vakuum in Farad pro Meter ($F m^{-1}$)
ϵ_H	Relative spektrale Breite der BRAGG-Beugung (dimensionslos)
ϵ_N	Normierte Emittanz in Meter Radiant (mrad)
ϵ_{Proj}	Projizierte Emittanz in Meter Radiant(mrad)
ϵ_{Slice}	Emittanz einer Scheibe im Elektronenpaket in Meter Radiant(mrad)
ϵ_x	Normierte Emittanz in x-Richtung in Meter Radiant (mrad)
ϵ_y	Normierte Emittanz in y-Richtung in Meter Radiant (mrad)
η	Relative Energieabweichung von der Resonanzenergie (dimensionslos)
η_d	Beugungsparameter (dimensionslos)
η_ϵ	Winkelparameter (dimensionslos)
η_γ	Parameter der Energieabweichung (dimensionslos)
Γ	Verstärkungsparameter (dimensionslos)
γ_0	Kosinus der Richtung des einfallenden Strahls bezüglich der Kristalloberfläche (dimensionslos)
γ_H	Kosinus der Richtung des gebeugten Strahls ohne Korrektur der Brechung an der Oberfläche des Kristalls bezüglich der Kristalloberfläche (dimensionslos)
$\Gamma(M)$	Gammaverteilung
γ_r	Relativistischer LORENTZ-Faktor (dimensionslos)
γ_{rel}	Relativistischer LORENTZ-Faktor der Elektronenenergie (dimensionslos)
$\bar{\gamma}_{rel}$	Relativistischer LORENTZ-Faktor der mittleren longitudinalen Geschwindigkeit $\bar{v}_z$ (dimensionslos)
$\varkappa$	Korrektur zur Brechung des Wellenvektors an der Grenzfläche zwischen Vakuum und Kristall (dimensionslos)
Λ	Korrektur zur 1D Verstärkungslänge (dimensionslos)
λ_B	BRAGG-Wellenlänge in Meter (m)
λ_c	Zentralwellenlänge der BRAGG-Reflexion in Meter (m)
λ_C	Spezifische Wärmeleitfähigkeit in Watt pro Meter und Kelvin ($W m^{-1} K^{-1}$)

λ_{Eff}	Effektive Wärmeleitfähigkeit in Watt pro Meter und Kelvin ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)
λ_{Rad}	Wellenlänge der Undulatorstrahlung in Meter (m)
λ_{U}	Undulatorperiode in Meter (m)
μ_0	Permeabilität im Vakuum in Newton pro Ampère zum Quadrat (N A^{-2})
$\vec{\nabla}_{\text{r}}$	Nabla-Operator in Ortskoordinaten
$\vec{\nabla}_{\text{v}}$	Nabla-Operator in den Geschwindigkeitskoordinaten
ω_{Krit}	Kritische Frequenz der Synchrotronstrahlung in Hertz (Hz)
ω_{Krist}	Strahltille am Kristall in Meter (m)
ω_{Rad}	Kreisfrequenz der Undulatorstrahlung in Hertz (Hz)
ω_0	Strahltille in Meter (m)
Φ	Photonenfluss in pro Sekunde (s^{-1})
ϕ	Phase (dimensionslos)
Φ_{Avg}	Mittlerer Photonfluss in pro Sekunde (s^{-1})
ϕ_{Ext}	Phase zur Korrektur der Eindringtiefe (dimensionslos)
ψ	Ponderomotive Phase (dimensionslos)
ψ_0	Phase zwischen Elektronen und Lichtfeld (dimensionslos)
q	Ladung des Elektronenpakets in Coulomb (C)
ρ	Dichte in Gramm pro Kubikcentimeter (g cm^{-3})
ρ_{FEL}	FEL-Parameter (dimensionslos)
σ_{E}	Bandbreite (rms) der Photonen in Elektronenvolt (eV)
$\sigma_{E_{\text{B}}}$	Standardabweichung der Energieverteilung der Elektronen in Elektronenvolt (eV)
σ_{η}	Normierte Standardabweichung der Elektronenenergieverteilung (dimensionslos)
σ_{ω}	Bandbreite (rms) der Photonen in Hertz (Hz)
σ_{R}	Strahlgröße in Meter (m)
σ_{SB}	Stephan Boltzmann Konstante für Phononen in Watt pro Quadratmeter pro Kelvin zur vierten Potenz ($\text{W/m}^{-2}\text{K}^{-4}$)
σ^2	Varianz
Σ_x	Kombinierte Elektronen- und Photonenstrahlgröße in x-Richtung im Meter (m)
$\Sigma_{\theta x}$	Kombinierte Elektronen- und Photonenstrahldivergenz in x-Richtung im Radiant (rad)
Σ_y	Kombinierte Elektronen- und Photonenstrahlgröße in y-Richtung im Meter (m)
$\Sigma_{\theta y}$	Kombinierte Elektronen- und Photonenstrahldivergenz in y-Richtung im Radiant (rad)
τ_{Koh}	Kohärenzzeit der Photonen in Sekunden (s)
τ_{R}	Relaxationszeit der Phononen in Sekunden (s)

ϑ	Ablenkwinkel einer Linse in Radiant (rad)
$\theta_{\angle}$	Ablenkwinkel der Elektronen im Undulator in Radian (rad)
θ_B	BRAGG-Winkel in Radian (rad)
θ_{Krit}	Winkel der Totalreflektion in Radian (rad)
θ_{Rad}	Photonen Divergenz FWHM in Radiant (rad)
$\theta_{\triangleleft}$	Öffnungswinkel der elektromagnetischen Strahlung in Radian (rad)

Literaturverzeichnis

- ALTARELLI, M. et al., The European X-Ray Free-Electron Laser. Techn. Ber., DESY XFEL Project Group, European XFEL Project Team, 2007
- AMANN, J. et al., Nat. Photon. **6** (2012) 693
- ARTHUR, J. et al., Linac Coherent Light Source (LCLS). Techn. Ber., SLAC, 2002
- AUNE, B. et al., Phys. Rev. ST Accel. Beams **3** (2000) 092001
- AUTHIER, A., Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. Oxford University Press, Oxford. 2001
- BAIERLEIN, R., Thermal Physics. Cambridge Univ. Press, Cambridge. 1999
- BAZAROV, I. V., Overview of Energy Recovery Linacs. Proc. PAC05, 2005. S. 1
- BEAUD, P. et al., J. of Quant. Elec. **31** (1995) 317
- BERMAN, R. et al., J. of Phys. C **8** (1975) L430
- BLASDELL, R. et al., Diamond Monochromators for APS Undulator-A Beamlines. Techn. Ber. ANL/APS/TB-24, ANL, 1995
- BÖDEWADT, J., Transverse Beam Diagnostics for the XUV Seeding Experiment at FLASH. Dissertation, Universität Hamburg, 2011
- BONIFACIO, R. et al., Opt. Comm. **50** (1984) 373
- BORLAND, M., User's Manual for elegant, 25. Aufl. Argonne. 2012
- BRAGG, W. H., Nature **90** (1912) 219
- BRAGG, W. H. et al., Proc. of the Roy. Soc. of London A **88** (1913) 428
- CASIMIR, H., Physica **5** (1938) 495
- CHILDS, G. et al., Thermal conductivity of solids at room temperature and below: a review and compilation of the literature. NBS monograph. National Bureau of Standards. 1973
- CLARK, C. D. et al., Proc. of the R. Soc. London A **277** (1964) 312
- COLELLA, R. et al., Opt. Comm. **50** (1984) 41
- COOLEY, J. et al., Math. Comp. **19** (1965) 297
- COTTERILL, R. M. J., App. Phys. Lett. **12** (1968) 403
- DEBYE, P., Annalen der Physik **348** (1913) 49

- DEL RIO, M. S. et al., Manual X-ray Oriented Programs. 2010
- DEMIRBAS, U. et al., Opt. Express **17** (2009) 14374
- DEMIRBAS, U. et al., Opt. Lett. **33** (2008) 590
- DESORBO, W., J. of Chem. Phys. **21** (1953) 876
- DING, Y. et al., Phys. Rev. ST Accel. Beams **14** (2011) 120701
- DOHLUS, M. et al., Ultraviolet and Soft X-Ray Free-Electron Lasers: Introduction to Physical Principles, Experimental Results, Technological Challenges. Springer Publishing Company, Incorporated, Hamburg. 2008
- DRUON, F. et al., Comptes Rendus Physique **8** (2007) 153
- DZIUK, G., Theorie und Numerik Partieller Differentialgleichungen. De Gruyter Studium. De Gruyter, Berlin. 2010
- EDWARDS, D. A., TESLA Test Facility Linac Design Report. Techn. Ber., DESY, 1995
- EFIMOV, V. et al., Physica B **263–264** (1999) 745
- EMMA, P. et al., Nat. Photon. **4** (2010) 641
- EULER, L., Institutiones calculi integralis. Institutiones calculi integralis. Ticini. 1792
- EWALD, P. P., Annalen der Physik **359** (1917) 557
- FAN, D. et al. (Hg.), Optical performance of Cr:YSO Q-switched Cr:LiCAF and Cr:LiSAF lasers. SPIE, 2002. Bd. 4914
- FAWLEY, W. M., Phys. Rev. ST Accel. Beams **5** (2002) 070701
- FAWLEY, W. M., A User Manual for GINGER and its Post-Processor XPLOTGIN, 1. Aufl. San Francisco. 2004
- FAWLEY, W. M. 2009. Private Kommunikation
- FELDHAUS, J. et al., Opt. Comm. **140** (1997) 341
- FLUBACHER, P. et al., Phil. Mag. **4** (1959) 273
- FOURIER, J., Théorie analytique de la chaleur. Chez Firmin Didot, père et fils. 1822
- FREELAND, J. W. et al., Rev. Sci. Inst. **73** (2002) 1408
- FRIEDRICH, W. et al., Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen. Sitzungsberichte der Mathematisch-Physikalischen Klasse der Königlich-Bayerischen Akademie der Wissenschaften zu München. Verlag der Kgl. Bayer. Akad. der Wiss. 1912
- FRIGO, M. et al., FFTW for version 3.3.2. 2012
- GELONI, G. et al., A Simple Method for Controlling the Line Width of SASE X-Ray FELs. DESY Report 10-053, DESY, 2010a

- GELONI, G. et al., New Journal of Physics **12** (2010b) 035021
- GLASSBRENNER, C. J. et al., Phys. Rev. **134** (1964) A1058
- GUINIER, A., X-Ray Diffraction: In Crystals, Imperfect Crystals, and Amorphous Bodies. Dover Books on Physics Series. Dover. 1994
- HINTERBERGER, F., Physik der Teilchenbeschleuniger und Ionenphysik. Springer-Verlag, Berlin. 2008
- HUANG, Z. et al., Phys. Rev. ST Accel. Beams **10** (2007) 034801
- JACKSON, J. D., Classical Electrodynamics, 5. Aufl. J. Wiley & Sons, Inc., London. 1966
- JOSHI, A. A. et al., J. of Appl. Phys. **74** (1993) 31
- KARSENBERG, J. et al., FEL-Oscillator Simulations with Genesis 1.3. Proc. FEL06, 2006. S. 3
- KARSENBERG, J. G. et al., OPC-Manual, 0. Aufl. Twente. 2008
- KEIL, B. et al., Design of an Intra-Bunch-Train Feedbacksystem for the European XFEL, Art. WEPB02. Proc. DIPAC07, 2007. S. 3
- KEWISH, C. M. et al., Appl. Opt. **46** (2007) 2010
- KIM, K.-J., Design of an X-ray cavity for an XFEL. unpublished. 2009
- KIM, K.-J. et al., Phys. Rev. ST Accel. Beams **12** (2009) 030703
- KIM, K.-J. et al., Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 244802
- KISHIMOTO, S., J. of Synch. Rad. **5** (1998) 275
- KITTEL, C., Introduction to Solid State Physics. J. Wiley & Sons. 1986
- KONDRATENKO, A. M. et al., Part. Acc. **10** (1980) 207
- KOPF, D. et al., Appl. Phys. B **65** (1997) 235
- LEE, S., Accelerator Physics. World Sci., London. 1999
- LIGHTSOURCES.ORG. 2012. URL <http://www.lightsources.org>
- LINDBERG, R. R. et al., Phys. Rev. ST Accel. Beams **14** (2011) 010701
- LINDBERG, R. R. et al., Simulation Studies of the X-Ray Free-Electron Laser Oscillator, Art. WEPC40. Proc. FEL09, 2010. S. 3
- LYON, K. G. et al., J. App. Phys. **48** (1977) 865
- MAAG, C. et al., Electron Optics and Magnetic Chicane For Matching an XFEL-Oscillator Cavity Into a Beamline at the European XFEL Laboratory, Art. WEPD18. Proc. FEL12, 2012. S. 2
- MACFARLANE, G. et al., J. of Phys. and Chem. of Solids **8** (1959) 388

- MADEY, J., Il Nuovo Cimento B **50** (1979) 64
- MAJUMDAR, A., J. of Heat Trans. **115** (1993) 7
- MARSI, M. et al., Appl. Phys. Lett. **80** (2002) 2851
- MATTHEWS, D. L. et al., Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 110
- MAXWELL, J. C., Phil. Trans. Roy. Soc. **155** (1865) 459
- McSKIMIN, H. J. et al., J. of Appl. Phys. **43** (1972) 2944
- MILLER, W., A treatise on crystallography. Deighton. 1839
- NYQUIST, H., Am. Inst. Elec. Eng. **47** (1928) 617
- PARK, G. T. et al., XFEL cavity with asymmetric crystals. 2012
- PELLEGRINI, C., T. Euro. Phys. J. H **37** (2012) 659
- PHILIPP, H. R. et al., Phys. Rev. **120** (1960) 37
- PILLA, V. et al., J. Opt. Soc. Am. B **21** (2004) 1784
- PRESS, W. H. et al., Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, 2. Aufl. Cambridge Univ. Press. 1996
- QIU, T. Q. et al., J. of Heat Trans. **115** (1993) 835
- QUARTERONI, A. et al., Wissenschaftliches Rechnen mit MATLAB. Springer-Lehrbuch. Springer. 2005
- RAMIAN, G., Nucl. Inst. and Meth. A **318** (1992) 225
- RAPOPORT, W. R., Excited-State Absorption and Upconversion in Cr:LiSAF. Optical Society of America, 1992. S. CL6
- REICHE, S., Numerical Studies for a Single Pass High Gain Free-Electron Laser. Dissertation, Universität Hamburg, 1999
- RIMJAEM, S. et al., Measurements of Transverse Projected Emittance for Different Bunch Charges at PITZ. Proc. FEL10, 2010. S. 1
- ROHRINGER, N. et al., Nature **481** (2012) 488
- RÖNTGEN, W. C., Eine neue Art von Strahlen. 1896. Aus den Sitzungsberichten der Würzburger Physik.-Medic. Gesellschaft 1895
- SALDIN, E. et al., Nucl. Inst. and Meth. A **475** (2001) 357
- SALDIN, E. et al., Nucl. Inst. and Meth. A **429** (1999) 233
- SALDIN, E. L. et al., The Physics of Free Electron Lasers. Springer-Verlag, Berlin. 2000
- SCHLARB, H., Private Kommunikation. 2012

- SCHMÜSER, P., Physik in unserer Zeit **16** (1985) 16
- SCHREIBER, S. et al., FLASH Operation as an FEL User Facility. Proc. PAC09, 2009. S. 3
- SCHREIBER, S. et al., FLASH Upgrade and First Results. Proc.FEL10, 2010. S. 3
- SHVYD'KO, Y., X-Ray Optics. Springer-Verlag, Berlin. 2004
- SHVYD'KO, Y. et al., Nat. Photon. **5** (2011) 539
- SHVYD'KO, Y. et al., Nat. Phys. **6** (2010) 196
- SINN, H., Heat load estimates for the XFEL beamline optics. 2006. Nicht veröffentlicht
- SLACK, G. A. et al., J. of Appl. Phys. **46** (1975) 89
- STEPANOV, S., X-RAY SERVER. 2012. URL <http://segrey.gmca.aps.anl.gov>
- STOUPIN, S. et al., Rev. Sci. Inst. **81** (2010a) 055108
- STOUPIN, S. et al., Phys. Rev. Lett. **104** (2010b) 085901
- SUCKEWER, S. et al., Las. Phys. Lett. **6** (2009) 411
- SUCKEWER, S. et al., Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 1753
- SUCKEWER, S. et al., Science **247** (1990) 1553
- SUTHERLAND, R. et al., Handbook of Nonlinear Optics, 2. Aufl. Optical Engineering Series. Marcel Dekker. 2003
- TANAKA, T. et al., SPring-8 Compact SASE Source (SCSS) Conceptual design report. Techn. Ber., RIKEN Harima Institute, 2005
- THUROW, B. S. et al., Appl. Opt. **48** (2009) 2086
- VAN INGEN, G. et al., Scripta Metallurgica **4** (1970) 733
- VINKO, S. M. et al., Nature **482** (2012) 59
- VON LAUE, M., Ergebnisse der Exakten Naturwissenschaften **10** (1931) 137
- WALKER, W. C. et al., Phys. Rev. **134** (1964) A153
- WALLER, I., Zeitschrift für Physik **17** (1923) 398
- WECKERT, E. et al., Acta Cryst A **53** (1997) 108
- WILLE, K., Physik der Teilchenbeschleuniger und Synchrotronstrahlungsquellen. Teubner Studienbücher. Teubner. 1996
- WINICK, H., J. of Elec. Spec. and Rel. Phen. **75** (1995) 1
- XIE, M., Nucl. Inst. and Meth. A **445** (2000) 59

- ZAGOROTNOV, I., Beam Dynamics and SASE Simulations for XFEL. 2011. Vortrag in „beam dynamics meeting“, DESY
- ZEMELLA, J. et al., Study of a silicon based XFEL for the European XFEL, Art. TUPA07. Proc. FEL11, 2011. S. 4
- ZEMELLA, J. et al., Numerical Simulations of an XFEL for the European XFEL driven by a Spent Beam, Art. WEPD19. Proc. FEL12, 2012. S. 4
- ZIMAN, J., Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids. Oxford Classic Texts in the Physical Sciences. Oxford Univ. Press. 2001