



# Universitatea Națională de Știință și Tehnologie Politehnica București

Școala Doctorală de Ingineria și Aplicațiile Laserilor și  
Acceleratorilor

Rareș Iovănescu

---

## Fenomene în accelerarea cu laser în plasmă folosind simulări PIC

---

Rezumat Teză de doctorat

Coordonator  
CS I Dr. Cătălin M. Ticoș

București, 2025



# Cuprins

1	Motivare și structura tezei	4
2	Considerente din literatură	5
3	Contribuții	14
4	Concluzii	20
	Bibliografie	21

# 1 Motivare și structura tezei

În cadrul acestui rezumat al tezei vom prezenta cele mai importante aspecte, atât prin prezentarea elementelor din literatura de specialitate, cât și contribuțiile de cercetare în literatură, și de asemenea și structura tezei.

Scopul cercetării prezentate în continuare este studiul interacției laser-plasmă, în special accelerarea wakefield cu laser (laser wakefield acceleration (LWFA)), radiația emisă în acest proces, folosind simulările PIC (particulă în celulă). Acest mecanism de accelerare a fost pentru prima oară propus teoretic în 1979 [1] și a avut parte de un interes științific ridicat, datorită aplicațiilor sale, precum accelerarea electronilor și emisia de radiație X, având multiple aplicații industriale și de cercetare fundamentală. Accelerarea în acest mecanism are loc pe distanțe scurte ordinul milimetrilor și centimetrilor ajungând la energii de ordinul GeV-ilor, mult mai puțin costisitor comparat cu acceleratoarele clasice radio-frecvență. Realizăm în această teză o descriere amănunțită a acestor aspecte, incluzând dinamica accelerației electronilor, radiația betatron emisă de aceștia în timpul accelerației și realizăm simulări 2D în codul EPOCH și abordăm și aspectele computaționale ale algoritmului de simulare.

Structura tezei constă în zece capitole și un o anexă, iar după introducere în Capitolul 1, urmează descrierea interacției undelor electromagnetice cu plasma în Capitolul 2 și a accelerării wakefield cu laser în Capitolul 3. În Capitolul 4 este descrisă radiația emisă de o sarcină în mișcare, iar în Capitolul 6 sunt abordate simulările computaționale pentru interacția laser-plasmă. Următoarele patru capitole descriu contribuțiile originale în literatură, începând cu optimizarea simulărilor PIC în Capitolul 6, modelare cu un câmp central a dinamicii electronului în LWFA în Capitolul 7, studiul electronilor injectați în structuri filament în capitolul 8, și LWFA într-o densitate periodică de plasmă în Capitolul 9. Urmează apoi concluzia în Capitolul 10, iar apoi prezentăm într-o anexă calculele mai detaliate întâlnite pe parcurs.

Vom prezenta în continuare principalele elemente existente în literatură în aceste domenii, constituind o bază pentru acest studiu.

## 2 Considerente din literatură

În acest capitol vom descrie fundamentele teoretice din literatură, pentru cercetarea noastră, abordate în Capitolele 2-5, despre interacția laser-plasmă, accelerarea wakefield cu laser, radiația emisă de o sarcină în mișcare și simulările computaționale.

### Unde electromagnetice în plasmă

În Capitolul 2 este studiată interacția undelor electromagnetice cu plasma și propagarea lor. Studiem, pentru început, teoria cinetică a plasmei și obținem ecuația Vlasov [2] din ecuația Boltzmann fără termenul de coliziune, care este, de asemenea folosită în simulările PIC pentru a descrie distribuția plasmei. Această ecuație afirmă că derivata totală la timp a funcției de distribuție în spațiul fazelor  $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$  este zero. Această distribuție descrie probabilitatea pe unități de volum în spațiul fazelor ca o particulă de găsească la poziția  $\mathbf{x}$ , având impulsul  $\mathbf{p}$  la timpul  $t$ .

Studiem apoi relația de dispersie a unei unde electromagnetice în vid și plasmă. Această relație leagă pulsația de numărul de undă. Aceasta este obținută din ecuațiile lui Maxwell, fără surse,  $\rho$  și  $\mathbf{j}$ , în cazul vidului, și cu surse pentru plasmă, obținând relația  $\omega^2 = \omega_p^2 + k^2 c^2$ . Această relație este necesară pentru a calcula cele două viteze care descriu propagarea undei, viteza de fază,  $v_\phi = \omega/k$ , și viteza de grup  $v_g = d\omega/dk$ . Putem observa ca viteza de fază nu transportă informație și este în plasmă mai mare decât  $c$ . Aceste viteze sunt folosite în continuare pentru a obține indicele de refracție al unui mediu, care este, în general,  $n = c/v_\phi = \sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ , și pentru plasmă este obținut ca  $\sqrt{1 - \omega_p^2/\omega^2}$ , fiind mai mic decât unu. Observăm de asemenea că pentru plasmă,  $v_\phi v_g = c^2$ .

Aceste mărimi sunt folosite mai departe pentru a studia efectul Kerr care induce o auto-focalizare a laserului, și se întâmplă în cazul unui puls foarte intens care modifică indicele de refracție neliniar, creând un indice de refracție mai mic la margini decât în centru. Astfel, unda este supusă refracțiilor succesive între aceste straturi cu indice de refracție care scade, iar în final acestea pot compensa

difracția sa, ajungându-se la auto-focalizare. Calculăm de asemenea, puterea necesară pentru ca efectul Kerr să aibă loc și cum este modificat indicele de refracție datorită termenilor neliniari din densitatea de polarizare.

### Accelerarea wakefield cu laser

În Capitolul 3, studiem aspectele fundamentale ale accelerării wakefield cu laser. Acestea încep cu descrierea forței ponderomotoare a unui laser care intră într-o plasmă. Această forță induce electronilor o mișcare spre marginile pulsului și creează în spatele laserului o cavitate liberă de electroni, numită bulă (bubble). Electronii pot fi prinși în această structură de potențialul atractiv al câmpului ionilor din bulă și ulterior accelerați la energii mari. Vom calcula inițial expresia forței ponderomotoare, în cazurile relativist și nerelativist. Această forță este medie pe o perioadă a laserului,  $2\pi/\omega$  și este independentă de semnul sarcinii particulei, expulzându-le către zonele cu câmp mai slab indiferent de semnul sarcinii. Valoarea sa obținută relativist este  $-mc^2 \nabla \gamma$ , și factorul Lorentz se poate exprima ulterior folosind potențialul magnetic al laserului.

În continuare, studiem diferiți parametri ai laserului, importanți pentru accelerarea wakefield, precum intensitatea laserului, care este media vectorului Poynting. Este obținută ca  $I = \epsilon_0 c E_0^2 / 2$ , iar factorul 2 este datorat medierii pe o perioadă a câmpului. Un alt parametru important este potențialul vectorial normalizat al laserului, care este dat de  $a = eA/(mc)$ . Acesta descrie impulsul maxim transferat de către laser electronului și poate fi de asemenea folosit în formula forței ponderomotoare relativiste pentru a exprima factorul Lorentz.

Acest mecanism de accelerare are însă și unele limitări. Descriem în continuare două dintre acestea, defazarea și epuizarea laserului. Prima dintre ele limitează accelerarea electronului până când acesta ajunge aproximativ la jumătatea bulei, având după acel punct mai multă sarcină pozitivă în spate decât în față. Astfel, Câmpul electric va fi orientat invers și va cauza decelerarea lui. Distanța totală de accelerare va până când electronul ajunge la mijlocul bulei este numită lungime de defazare. Cealaltă limitare, este dată de lungimea de epuizare a laserului. Aceasta este cauzată de faptul că partea frontală a acestuia va întâlni o densitate mai mare a plasmă înainte de expulzarea electronilor, rezultând astfel, un indice de refracție mai mic și o viteză de grup mai mică comparat cu restul pulsului. În plus, partea frontală transferă din energia laserului către plasmă, reducând energia laserului. Diferența obținută între viteza de grup a laserului și această viteză frontală mai mică este numită viteză de eroziune (etching) și este aproximativ egală cu  $c\omega_p^2/\omega^2$ . După ce partea din spate a pulsului, călătorind cu această viteză relativă față de partea din față, o ajunge pe aceasta din urmă, puterea laserului este epuizată și mecanismul accelerare al electronilor nu mai are loc. Distanța până unde electronii sunt accelerați până la acest moment este numită lungimea de epuizare a laserului.

A fost studiat în continuare mecanismul de auto-injectare al electronilor în bulă, care este condiția necesară pentru ca aceștia să fie accelerați ulterior. Condiția necesară pentru ca electronul să fie prins în potențialul atractiv al ionilor din bulă va fi ca Hamiltonianul său  $H < 0$ . Acest poate fi scris ca  $H = \gamma mc^2 - e\phi - v_0 P_x$ , unde  $v_0$  este viteza bulei,  $P_x$  impulsul canonic al electronului în această direcție și  $\phi$  potențialul electric. Acest rezultat a fost descris în detaliu în Anexă, unde vom calcula Lagrangianul și Hamiltonianul pentru un electron relativist, folosind un potențial generalizat, pentru că forța Lorentz nu este conservativă. Au fost obținute de aici ecuațiile Hamiltoniene, conținând derivatele la timp ale componentelor de poziție și impuls canonic, ca funcții de potențialul electric și magnetic. Aceste pot fi rezolvate, rezultând diferite traiectorii ale electronilor, în funcție de condițiile date. A fost apoi calculată accelerația electronilor într-o bulă sferică și analizați parametrii plasmă și laserului pentru care defazarea sau epuizarea laserului sunt o limitare mai puternică. A fost studiat în continuare efectul de auto-focalizare al laserului în plasmă. Acesta se datorează mai multor cauze, care acționează sinergic în sensul auto-focalizării. Acestea sunt, contribuția termică, atunci când o parte din plasmă experimentează o transformare adiabatică în urma interacției cu laserul și își reduce astfel densitatea, crescând indicele de refracție. Celelalte două cauze sunt auto-focalizarea ponderomotoare și relativistă, unde un gradient de densitate al electronilor expulzați este creat de forța ponderomotoare și unde creșterea masei relativiste ale electronilor modifică pulsația plasmă. Indicele de refracție va fi atunci,

$$n = \sqrt{1 - \frac{n_e}{\gamma n_c}}. \quad (2.1)$$

Aceste două efecte sunt analizate folosind un model cu o funcție de distribuție Vlasov [3] și considerând acțiunea forței ponderomotoare și de separare a sarcinilor.

## Radiația emisă de o sarcină în mișcare

Electronii accelerați oscilează transversal în timpul mișcării în bulă și astfel, emit radiație de tip sincrotron, numită în acest caz radiație betatron. În Capitolul 4, studiem această radiație emisă de sarcini în mișcare. Vom începe descrierea cu relația lui Larmor care exprimă puterea emisă de o sarcină accelerată în linie dreaptă. Pentru a fi dedusă această expresie este necesar să fie obținută componenta transversală a câmpului electric. Folosind aceasta, obținem vectorul Poynting și integrându-l pe unghiul solid, obținem puterea radiată astfel,  $P = a^2 q^2 / (6\pi\epsilon_0 c^3)$ . Observăm aici că puterea radiată nu depinde nici de semnul sarcinii, nici de cel al accelerației. Cu toate acestea, formula a fost obținută înainte de teoria relativității și astfel nu conține efectele produse la viteze foarte mari.

Pentru a rezolva acest lucru, este folosit un caz specific de potențiale întârziate, numite potențialele Liénard–Wiechert. Deducerea lor începe cu cea a timpului întârziat, care reprezintă timpul la care o undă electromagnetică începe să se propage cu  $c$  spre punctul de observare. Folosind timpul întârziat și etalonarea Lorentz, sunt obținute potențialele și câmpurile întârziate. Folosind apoi câmpurile, este obținut vectorul Poynting și ulterior puterea radiată la timpul întârziat, integrând pe unghiul solid și înmulțind cu derivata timpului întârziat la timp. Folosind acest rezultat, este obținută o generalizare a formulei lui Larmor, pentru cazul relativist, numită formula lui Liénard și arată că puterea radiată crește cu  $\gamma^6$ . Aceasta descrie o traiectorie arbitrară a particulei. Pentru o traiectorie curbilinie radiația este sincrotronică. Deoarece într-o traiectorie circulară cu aceeași viteză  $v$ , accelerația este dată doar de componenta radială  $v^2/r$ , rezultă că puterea radiată într-o mișcare circulară a aceleași sub acțiunea aceleași forțe va fi mai mare cu un factor de  $\gamma^2$  decât în cazul mișcării rectilinii. În continuare, obținem spectrul fotonilor emiși folosind transformata Fourier a câmpului electric ca o funcție de pulsație, introducând, de asemenea și pulsația critică care descrie punctul peste care este emisă jumătate din putere și jumătate dedesubt.

Această descriere a radiației va fi folosită în continuare pentru studiul radiației betatron obținută în accelerarea wakefield, și care este o radiație de tip sincrotron. Electronii injectații bulă oscilează transversal, acestea fiind numite oscilații betatron. Astfel, accelerarea lor pe o traiectorie sinusoidală va produce radiație betatron. Datorită creșterii relativiste a masei în timpul acestei accelerări, amplitudinea oscilației scade în timp, iar lungimea de undă crește. Cel mai important parametru care descrie această mișcare este parametrul de intensitate al oscilației  $K = \gamma v_{\perp}/c$ , unde  $v_{\perp}$  este viteza maximă transversală a electronului obținută pe axa orizontală. Aceste oscilații pot avea două regimuri, regimul de oscilații slabe, când  $K \ll 1$  și regimul de oscilații puternice, pentru  $K \gg 1$ .

Radiația este emisă în sensul mișcării într-un con cu semiunghiul la vârf  $\theta = 1/\gamma$ , în cazul regimului de oscilații slabe și  $\psi = K/\gamma$  în cazul regimului cu oscilații puternice. Pulsația acestor oscilații scade, de asemenea, cu factorul Lorentz, și este dată de  $\omega_{\beta} = \omega_p/\sqrt{2\gamma}$ . considerând traiectoria o sinusoidă, raza de curbura minimă este obținută în poziția transversală maximă și este  $\rho_0 = \lambda_u \gamma/(2\pi K)$ , unde  $\lambda_u$  este lungimea de undă a oscilației electronilor. Pulsația critică este obținută pentru această rază,  $\omega_c = 3c\gamma^3/(2\rho_0)$ . Alți parametri calculați sunt puterea și energia medie și numărul de fotoni, radiați pe electron pe ciclu de oscilație.

## Simulări computaționale

În Capitolul 5, studiem simulările computaționale, care folosesc algoritmul PIC și metoda diferențelor finite în domeniul temporal (FDTD). În algoritmul PIC de modelare a dinamicii plasmei, mulțimi de particule sunt înlocuite cu mai



puține macro-particule, cărora le este atribuită o pondere, semnificând numărul de particule real pe macro-particulă. Spațiul și timpul sunt discretizate, folosind o rețea în cazul spațiului și vom considera cazul coordonatelor Carteziene. Câmpurile electrice și magnetice sunt calculate pe nodurile rețelei, folosind de obicei metoda FDTD.

Există mai multe variante ale algoritmului FDTD. Algoritmul original a fost propus de K. Yee în 1966 [4] și actualizează câmpurile electrice la pașii întregi pe rețea și câmpurile magnetice la pașii semi-întregi (algoritm leapfrog). Alte variante ale acestuia, precum cea folosită în codul EPOCH, calculează câmpurile atât la poziții întregi, cât și la poziții semi-întregi. Acestea sunt obținute succesiv, folosind ecuațiile lui Maxwell, iar derivata pe rețeaua discretizată este scrisă ca

$$\left(\frac{\partial E_y^n}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j,k} = \frac{E_{y_{i+1,j,k}}^n - E_{y_{i,j,k}}^n}{\Delta x}, \quad (2.2)$$

unde indicii  $(i, j, k)$  corespund direcțiilor spațiale și  $n$  pasului temporal. Aceasta este o diferențiere centrală și are eroare doar de ordinul doi, în timp de diferențierile în față și în spate au eroare de ordinul unu. Astfel, este cea mai exactă diferențiere în această metodă. O condiție necesară pentru consistența metodei FDTD este stabilirea de condiții la capete. Vom calcula condițiile de absorbție la margini, numite Silver-Müller, care asigură ieșirea undelor EM din fereastra de simulare, eliminând reflecția.

Studiem apoi algoritmul PIC și bucla sa de a actualiza pozițiile și vitezele particulelor pe rețea. Această buclă constă în patru pași, întâi interpolarea câmpurilor la pozițiile inițiale ale particulelor, apoi mecanismul de deplasare al particulelor pe rețea obținând noi valori pentru poziție și viteză, folosind forța Lorentz, urmat apoi de distribuirea curentului pe rețea, pentru a obține densitățile de sarcină și curent pe rețea, și urmat de rezolvarea ecuațiilor lui Maxwell pentru a obține câmpurile.

Descriem în continuare cei patru pași ai algoritmului PIC, începând cu mecanismul de deplasare al particulelor. Mai mulți algoritmi au fost propuși pentru acest caz, iar cel mai folosit este algoritmul Boris [5]. Este un algoritm leapfrog de ordinul al doilea iar metoda sa este de a separa în două partea lineară a accelerației datorată câmpului electric și să intercaleze rotația magnetică între ele. Parcurgem calculele acestui algoritm în cazurile relativist și nerelativist pentru a obține viteza după un pas temporal, folosind forța Lorentz.

Mai multe îmbunătățiri au fost propuse de-a lungul timpului la algoritmul Boris pentru a depăși limitările acestuia. Deși exact, în cazul relativist, algoritmul Boris are parte de erori în cazul vitezei de drift. Mai exact, când forța Lorentz se anulează,  $\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B} = \mathbf{0}$ , dar câmpurile nu sunt zero, apar erori numerice. Pentru a rezolva acest lucru, a fost propus algoritmul Vay [6] care calculează corect

viteza de drift. Diferența principală aici este că pentru  $\mathbf{E}^{n+1/2} + \mathbf{v}^n \times \mathbf{B}^{n+1/2} = \mathbf{E}^{n+1/2} + \mathbf{v}^{n+1} \times \mathbf{B}^{n+1/2} = \mathbf{0}$  și  $\gamma^{n+1}\mathbf{v}^{n+1} = \gamma^n\mathbf{v}^n$  acesta calculează corect câmpurile electromagnetice. Viteza folosită pentru a obține forța Lorentz nu conține în acest caz factorul relativist, rezultând în erori mai mici la viteze mari în comparație cu algoritmul Boris. Astfel, acest algoritm asigură o precizie mai bună pentru factori Lorentz mai mari și calculează mai exact viteza de drift, consumând, totuși, mai multe resurse computaționale decât algoritmul Boris. Totuși o problemă a algoritmului Vay este faptul că nu conservă volumul în spațiul fazelor, ceea ce este o condiție pentru sistemele Hamiltoniene, conform teoremei lui Liouville, în timp ce algoritmul Boris deși nu este symplectic, conservă volumul și eroare nu crește odată cu numărul de iterații.

Pentru a îmbunătății avansurile aduse de algoritmul Vay, un alt algoritm a fost propus ulterior și anume algoritmul Higuera-Cary [7]. Acest algoritm obține o viteză corectă de drift ca în cazul algoritmului Vay și conservă volumul spațiul fazelor ca algoritmul Boris. Deși necesită cea mai mare putere computațională dintre acești algoritmi, acesta este cel mai exact. De asemenea, vom verifica că algoritmul Boris, deși nu este symplectic, conservă volumul în spațiul fazelor, și de asemenea realizăm acest lucru și pentru algoritmul Higuera-Cary. Această condiție este îndeplinită când determinantul Jacobian al transformării lor este unu. Transformarea este dată de actualizarea poziției și vitezei la fiecare iterație,  $(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k) \rightarrow (\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{v}_{k+1})$ .

Pentru a descrie următorul pas al algoritmului PIC, distribuirea curentului, este necesar mai întâi să descriem funcția de formă (shape) a cvasi-particulelor, folosită în acest caz. Codurile PIC modelează dinamica plasmei folosind ecuațiile Vlasov-Maxwell, astfel că este necesară o funcție de distribuție a macro-particulelor. Funcția de distribuție este dată de

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \sum_{p=1}^{N_s} \frac{w_p}{V_c} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_p(t)), \quad (2.3)$$

unde  $S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t))$  este funcția de formă și  $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_p(t))$  descrie distribuția de impuls. Ponderea particulelor este dată de parametrul  $w_p$  și  $V_c$  este hipervolumul celulei. Această funcție de formă este normalizată la hipervolum și poate fi de mai multe ordine pentru o mai mare acuratețe. Prezintă expresiile primelor patru funcții de formă și reprezentarea lor grafică. Acestea derivă din funcțiile spline de bază (b-spline) și sunt adaptate la pasul rețelei. Cu ajutorul acestor funcții se poate obține distribuția curentului pe rețea, care este realizată cu algoritmul propus de Esirkepov [8]. În cazul acesta este folosită cantitatea  $W_p = qw_p/V_c$ , care este ponderea densității de sarcină și semnifică sarcina totală dintr-o celulă.

Următorul pas al algoritmului PIC este rezolvarea ecuațiilor lui Maxwell. Algoritmul aici urmărește să rezolve ecuațiile Maxwell-Faraday și Maxwell-Ampère

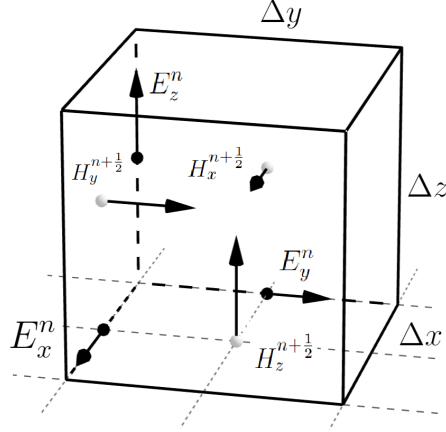


Figura 2.1: Reprezentarea câmpurilor electrice și magnetice pe rețeaua decalată a algoritmului Yee.

cu metoda FDTD, folosind pozițiile și vitezele obținute anterior și densitățile de curent. Dintre mai mulți algoritmi de rezolvare a ecuațiilor lui Maxwell existenți, vom descrie cel mai folosit dintre ele, algoritmul Yee precum și algoritmul propus de Pukhov. Metoda lui Yee discretizează spațiul și timpul și introduce o funcție de aceste patru variabile astfel,

$$F(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = F^n(i, j, k). \quad (2.4)$$

Rețeaua este prezentată în Fig. 2.1 care arată câmpurile electrice și magnetice calculate la poziții aflate la jumătate de iterație distanță. Sunt discretizate apoi ecuațiile lui Maxwell pentru cele trei direcții spațiale. Acest algoritm folosește o grilă decalată unde câmpurile electrice sunt calculate la poziții întregi ale rețelei și câmpurile magnetice la poziții semi-întregi. Prezintă și o reprezentare 3D a pozițiilor câmpurilor pe rețea. Astfel, prin rezolvarea acestor ecuații discretizate, obținem câmpurile electrice și magnetice la următorul pas temporal, folosind valorile la precedentul. Cealaltă metodă de rezolvare a ecuațiilor lui Maxwell este algoritmul descris de Pukhov [9]. Acesta aduce unele îmbunătățiri la cel propus de Yee, printre care reducerea dispersiei numerice pe axa cu cel mai scurt pas spațial și dă de asemenea, un ordin mai mare de acuratețe. Acestea sunt obținute print-un algoritm FDTD de discretizare modificat, care înmulțește câmpul electric în ecuația Maxwell-Faraday discretizată, cu patru coeficienți care depind de pasul spațial pe rețea. Un alt aspect diferit este o altă interpolare a câmpului magnetic, care este dată, în general, la poziții semi-întregi, ca medie a valorilor la poziții întregi vecine. Algoritmul Pukhov folosește o interpolare magnetică în patru puncte, mai exactă și este dată de

$$B_{i+\frac{1}{2},j} = a(B_{i,j} + B_{i+1,j}) + b(B_{i-1,j} + B_{i+2,j}), \quad (2.5)$$

unde constantele  $a + b = 0.5$ . Acești parametrii sunt calculați ca funcție a pasului pe rețea și a lungimii de undă.

Ultimul pas din cei patru ai algoritmului PIC este interpolarea câmpurilor. Acest pas are ca scop interpolarea câmpurilor pe pozițiile particulei în interiorul celulei folosind câmpurile obținute pe rețea. Aceasta este realizată cu funcția de formă,

$$\mathbf{E}_p^n = \frac{1}{V_c} \int d^3\mathbf{x} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^n) \mathbf{E}^n(\mathbf{x}), \quad \mathbf{B}_p^n = \frac{1}{V_c} \int d^3\mathbf{x} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p^n) \mathbf{B}^n(\mathbf{x}), \quad (2.6)$$

și așa cum a fost specificat anterior, câmpul magnetic este cel mai des interpolat la poziții semi-întregi ca medie a celor două poziții întregi vecine.

Descriem în continuare condiția Courant–Friedrichs–Lewy (CFL), care asigură stabilitatea numerică a algoritmului FDTD. Ideea acestei condiții este că actualizarea câmpurilor pe rețea trebuie făcută mai repede decât mișcarea particulelor. În caz contrar apar efecte numerice nedorite. Folosind viteza maximă a unei unde  $c$ , această condiție leagă pasul temporal și cel spațial, și în 1D este scrisă ca  $\Delta t \leq \Delta x/c$ , unde au fost folosiți intervalul spațial și temporal. Pe o rețea 2D această condiție poate fi văzută ca  $\Delta t \leq h/c$ , unde  $h$  este înălțimea într-un triunghi dreptunghic cu catetele  $\Delta x$  și  $\Delta y$ . Astfel, cea mai mică viteză numerică, obținută pe cea mai scurtă distanță, pentru o undă propagându-se oblic, trebuie să fie mai mare decât  $c$ . În mod analog, în cazul 3D, această distanță corespunde înălțimii în piramida triunghiulară formată dintr-un punct origine și având ca bază cele trei puncte vecine pe rețea la distanțele  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  și  $\Delta z$ . Prezentăm de asemenea, reprezentări ale acestor distanțe în 2D și 3D. Această condiție este scrisă în general,

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}. \quad (2.7)$$

Un alt mod de a obține această condiție este folosind ecuația discretizată a unde pe o rețea FDTD, care este scrisă ca

$$\frac{1}{c^2} \frac{\mathbf{E}_{a,b,c}^{n+1} - 2\mathbf{E}_{a,b,c}^n + \mathbf{E}_{a,b,c}^{n-1}}{\Delta t^2} = \frac{\mathbf{E}_{a+1,b,c}^n - 2\mathbf{E}_{a,b,c}^n + \mathbf{E}_{a-1,b,c}^n}{\Delta x^2} + \frac{\mathbf{E}_{a,b+1,c}^n - 2\mathbf{E}_{a,b,c}^n + \mathbf{E}_{a,b-1,c}^n}{\Delta y^2} + \frac{\mathbf{E}_{a,b,c+1}^n - 2\mathbf{E}_{a,b,c}^n + \mathbf{E}_{a,b,c-1}^n}{\Delta z^2}. \quad (2.8)$$

Înlocuind apoi câmpul cu un profil de undă plană de tipul,

$$\mathbf{E}_{a,b,c}^n(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}_0 \exp(i(k_x a \Delta x + k_y b \Delta y + k_z c \Delta z - \omega n \Delta t)), \quad (2.9)$$

va fi obținută din nou condiția CFL.

Având astfel stabilită o descriere a algoritmului PIC, vom studia apoi codurile PIC existente, în special codul EPOCH [10] pe care îl folosim în simulările noastre. Printre aceste coduri se numără SMILEI, FBPIC, OSIRIS, sau PICCANTE și sunt de asemenea coduri disponibile public. Codul EPOCH este scris în Fortran și folosește cantitățile fizice în SI, iar acestea sunt separate în blocuri în cadrul codului. Vom descrie în continuare cele mai importante dintre aceste blocuri. Unul dintre ele este blocul control, unde sunt specificate pașii spațiali și temporal și dimensiunile ferestrei de simulare. Blocul species care conține informația pentru un tip de particule, care sunt două în cazul plasmei, electroni și ioni, dar care poate conține unul și pentru fotoni dacă sunt incluse efecte de electrodinamică cuantică. În acest bloc sunt specificate sarcina, masa și densitatea de particule. Blocul laser specifică parametrii laserului, diametrul, lungimea de undă, poziția de focalizare, profilul temporal și durata. Alte blocuri specifică informații despre frontiere și condițiile lor, sau despre fereastra de simulare și viteza ei de deplasare. Codul utilizează și diferite opțiuni de compilare (flag), care pot modifica caracteristici ale codului, cum ar fi o funcție de formă de ordin mai mare sau pentru alegerea algoritmului Higuera-Cary în locul celui propus de Boris, precum și alți algoritmi pentru rezolvarea ecuațiilor lui Maxwell.

În continuare vom aborda în cea mai mare parte contribuțiile în literatură realizate pentru această teză.

## 3 Contribuții

În acest Capitol vom prezenta contribuțiile în literatură din care fac parte patru studii. Acestea cercetează optimizarea simulărilor PIC, modelare dinamicii electronului în accelerarea wakefield cu un câmp central relativist, observarea formării filamentelor de electroni în LWFA, și studiul accelerării wakefield într-o densitate periodică de plasmă.

### Optimizarea simulărilor PIC pentru LWFA

În acest prim studiu [11], vom investiga optimizarea parametrilor simulărilor PIC folosite pentru accelerarea wakefield cu laser. Vom observa cum variația dimensiunii pasului pe rețea pe direcțiile verticală și orizontală afectează energia electronilor accelerați. Studiem acest aspect prin simulări PIC 2D pentru LWFA folosind codul EPOCH, și păstrând constante parametrii laserului, plasmei, variind doar numărul de puncte ale rețelei. Urmărim astfel să obținem un echilibru eficient între acuratețe și puterea computațională, care crește la rândul ei. Dimensiunea ferestrei de simulare este de asemenea păstrată aceeași, respectiv  $\Delta X = 230\lambda$  și  $\Delta Y = 78\lambda$ , unde  $\lambda = 0.8\mu\text{m}$  este lungimea de undă a laserului. În primul set de simulări vom varia numărul de noduri ale rețelei pe direcție orizontală ( $nx$ ), luând valorile 3300, 3600, 3900 și 4100. A fost măsurat în fiecare caz energia maximă obținută a electronilor accelerați la intervale de 250 fs. Rezultatele arată că energia crește odată cu numărul de celule pe direcție orizontală și se apropie de o zonă de convergență. Prezentăm în fiecare caz graficele acestor energii și profilul spațial al densității de particule și distribuției de energie al electronilor.

Având aceste rezultate, am variat apoi numărul de noduri ale rețelei pe verticală ( $ny$ ), luând valorile 700, 900, 1000, 1100, și păstrând constante toți ceilalți parametri. În acest caz rezultate arată o descreștere a energiei odată cu creșterea numărului de celule și apropiindu-se din nou de o zonă de convergență. În următorul set de simulări au fost folosite diferite valori pentru numărul de particule în celulă, și anume 4 electroni și 2 ioni, în primul caz, 6 electroni și 3 ioni în al doilea, și 8 electroni și 4 ioni în ultimul caz. Aceste valori sunt stabilite pentru că folosim plasmă de Helium cu densitatea ionilor jumătate din densitatea electronilor. Codul

va da, însă, aceeași densitate datorită metodei de ponderare folosind  $w_p = nV_c/N$ , astfel că rezultatele noastre arată diferențe minime. Astfel, un număr mai redus de particule pe celulă va avea un impact neglijabil asupra rezultatelor, dar va reduce putere computațională necesară. În ultimul set de simulări a fost variat numărul de celule pe ambele direcții în timp ce a fost păstrată o formă pătrată a celulei. În acest caz, energiile electronilor accelerați au crescut cu numărul de celule.

Analizăm în continuare efectul asupra algoritmului Boris al variației numărului de celule. Așa cum a fost specificat, acest algoritm împarte în două componente accelerația liniară datorată câmpului electric și adaugă între ele componenta de rotație magnetică. Pentru că pașii spațiali și temporal sunt legați de condiția CFL, micșorând pasul spațial, se micșorează și pasul temporal, astfel, unghiul în rotația Boris va fi mai mic, rezultând un calcul mai exact. Această condiție pentru stabilitatea numerică a unghiului a fost calculată ca  $\Delta t \ll \lambda/(a_0 c)$  [12]. Cu toate acestea, este mai puțin restrictivă decât condiția CFL în acest caz, și în general pentru LWFA comparat cu accelerarea directă cu laser (DLA) unde electronul ajunge în zona cu câmp cel mai puternic.

De asemenea, investigăm și optimizarea computațională a simulărilor, măsurând numărul de procese MPI pentru ca simularea să fie rulată într-un timp minim. Rezultatele simulărilor PIC în EPOCH arată că timpul minim este obținut pentru 14 procese MPI.

Astfel, în cadrul acestui studiu am analizat impactul variației numărului de celule în ambele direcții și al numărului de particule pe celulă asupra energiei maxime a electronilor, precum și numărul de procese MPI pentru a obține cel mai mic timp de simulare. Aceste rezultate sunt utile în alegerea echilibrată între acuratețe și resurse computaționale.

## Modelarea dinamicii electronilor în LWFA cu un câmp central relativist

În al doilea studiu [13], vom investiga traiectoriile electronilor care formează în mecanismul LWFA. Vom modela aceste traiectorii cu un câmp central atractiv, considerând sarcina electrică din bulă poziționată în centrul ei și electroni deviați sub acțiunea ei. Astfel, electronii vor urma o traiectorie caracteristică unei mișcări în câmp central. Sunt observate două traiectorii. Una în care raza minimă a traiectoriei este deasupra axei orizontale, astfel electronii care închid bula vor fi orientați spre exteriorul ei. Și cea de-a doua când raza minimă este atinsă mai jos de axa orizontală și electronii vor fi orientați spre interiorul bulei, rezultând o injectare directă a lor.

Astfel, au fost efectuate calculele în acest model cu un câmp central, obținând raza minimă și unghiul ei polar corespunzător. Au fost obținute folosind conservarea energiei și momentului cinetic în această mișcare relativistă. Calculele au fost realizate în coordonate polare  $(r, \phi)$ , iar raza minimă este obținută când derivata

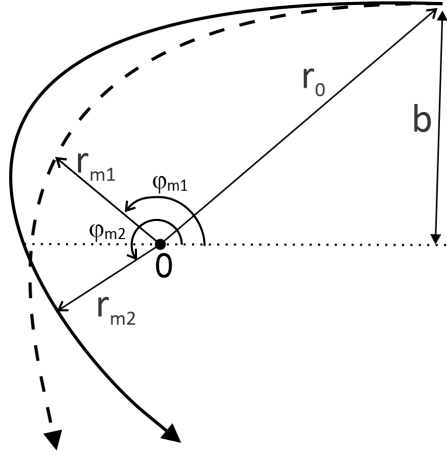


Figura 3.1: Reprezentarea celor două traiectorii întâlnite în modelarea cu un câmp central relativist.

la timp  $\dot{r} = 0$ . După ce a fost obținută raza minimă, calculăm de asemenea și unghiul corespunzător, obținând valori mai mici decât  $\pi$  când poziția este deasupra axei și valori mai mari când este dedesubt.

Vom simula două exemple ale acestor cazuri pentru un set de parametrii. Comparăm de asemenea și evoluția energiei maxime a electronilor pentru ambele cazuri și reprezentăm grafic acest lucru, obținând energii mai mari pentru bula formată cu raza minimă deasupra axei pentru care a fost folosită o densitate mai mare. Aceste simulări au fost realizate folosind pentru condiția CFL 0.8 din valoare maximă posibilă. Cele două traiectorii sunt prezentate în Fig. 3.1, și este observat cum unghiul polar este mai mic decât  $\pi$  când raza minimă este deasupra axei și mai mare decât  $\pi$  când este dedesubt.

Astfel, în acest studiu a fost propus un model analitic pentru descrierea dinamicii electronului în LWFA și verificat prin simulări PIC 2D, observând și particularitățile formării bulei.

### Structuri filament de electroni injectați în LWFA

În al treilea studiu [14] vom extinde cercetarea diferitelor forme ale bulei obținute în LWFA și de asemenea vom studia efectele care decurg mai departe din asta.

Pentru aceasta vom efectua simulări PIC 2D în EPOCH păstrând toți parametrii constanți și variind doar densitatea plasmei care va lua 6 valori, și anume 0.9, 1, 1.5, 2, 2.5 și  $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Observăm cum pentru primele patru densități bulele formate sunt mai mari și electronii care le închid în partea din spate sunt orientați către interior. Aceste traiectorii fac un unghi mai mare decât  $\pi$  în zona



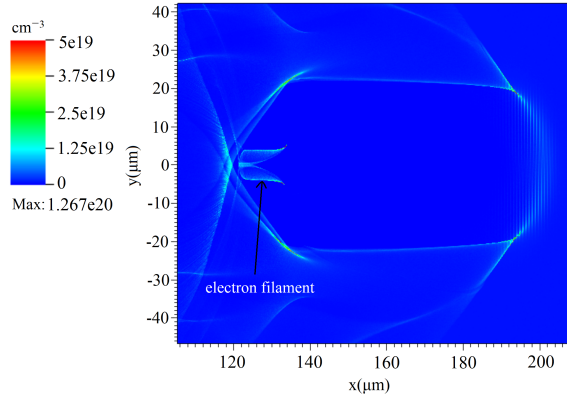


Figura 3.2: Structurile filament de electroni după un timp de simulare de 700 fs pentru o densitate a plasmei de  $9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

lor de închidere, măsurat în interiorul bulei. Pe de altă parte, pentru ultimele două densități, unde se formează bulei mai mici și într-un timp mai scurt, acestea se vor închide formând un unghi mai mic decât  $\pi$ . De aici rezultă o injectare diferită a electronilor și caracteristici diferite ale oscilațiilor betatron în continuare.

În fiecare caz a fost măsurat unghiul sub care se închide bula și timpul ei de formare și de asemenea au fost prezentate profilul spațial al distribuției de energie a electronilor obținut în simulări. Vom denumi aceste structuri de electroni injectați în bula ca structuri filament, și prezentăm formarea și evoluția lor în bulă în Fig. 3.2 după un timp de simulare de 700 fs. vom realiza în continuare grafice ale traiectoriilor corespunzătoare acestor cazuri, rezolvând ecuațiile Hamiltoniene cu algoritmul Runge-Kutta 4. Au fost obținute traiectorii pentru ambele cazuri, cu injectare spre interiorul și spre exteriorul bulei.

A fost studiat în continuare cum sunt influențați parametrii oscilațiilor betatron de aceste tipuri de injectare diferită. Principala diferență observată este o amplitudine mai mare de oscilație la densități mai mici, unde electronii sunt injectați spre interior. Factorul Lorentz a fost măsurat la mijlocul oscilației, ceea ce a dat valori mai mari pentru densitățile mai mari. Acest fapt se datorează câmpului electric mai puternic în bula formată la o densitate mai mare, care va accelera mai puternic electronii, în ciuda dimensiunii mai mici, în comparație cu o bulă formată la densitate mică. Astfel, parametrul de intensitate al oscilației, care crește cu amplitudinea  $r$  și cu  $\sqrt{\gamma}$ , va crește la rândul său cu densitatea, atingând valoarea maximă la densitatea a cincea. În cazul unghiului de emisie a radiației, care este dat de  $K/\gamma$ , s-a observat o scădere cu densitatea plasmei, datorită în principal amplitudinii mai mari la densitate scăzută. În aceste cazuri a fost măsurată și energia critică, care este dată de  $E_c = 3K^3 \hbar \gamma_z^2 \omega_\beta / 4$ , și folosește factorul Lorentz pe direcție longitudinală. Se observă o creștere cu densitatea, la fel ca

în cazul numărului de fotoni emiși pe electron pe ciclu de oscilație, care este de asemenea măsurat. Un alt parametru măsurat este lungimea de undă a oscilațiilor care este în creștere în ultimele două cazuri, unde bula se închide spre exterior, datorită accelerației mai mari la densități mai mari. Folosind aceste date au fost calculate și puterea și energie medie radiate pe electron pe ciclu de oscilație. În cazul ambelor este obținută o creștere pentru ultimele două densități.

De asemenea, a fost studiată formarea bulei și injectarea electronilor într-un profil de densitate al plasmăi care crește liniar la începutul simulării. Profilul de densitate are forma  $n_0 x/x_0$ , pentru  $x_0 < x$  și  $n_0$  după, care are valoarea  $2 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ , și au fost realizate trei simulări pentru valorile lui  $x_0$  de 5, 10 și 20  $\mu\text{m}$ . Efectul observat este ca unghiul de închidere al bulei scade cu creșterea distanței unde densitatea crește liniar. Bula se închide sub un unghi mai mic decât  $\pi$  încă de la doua creștere a acestei distanțe. În acest caz au fost mășurați și parametrii oscilației betatron și s-a observat o scădere a amplitudinii odată cu creșterea distanței unde densitate crește liniar. Datorită creșterii factorului Lorentz când aceste distanțe scad, injectarea electronilor este întârziată, de prinderea electronilor în marginea bulei, de asemenea factorul Lorentz este măsurat la mijlocul oscilației, iar acest lucru va crește puterea și energia radiate odată cu distanța de creștere a densității. Parametrul de intensitate al oscilației va înregistra însă variații mai scăzute în acest caz.

Astfel, în această cercetare a fost studiat cum este influențată geometria bulei de profiluri diferite de densități de plasmă și consecințele acestui fapt asupra oscilațiilor betatron. Acestea constituie o analiză amplă despre cum sunt influențate oscilațiile betatron când parametrii plasmăi sunt variați.

## LWFA cu un profil periodic de densitate

În al patrulea studiu [15], a fost abordată accelerarea wakefield într-o densitate periodică de plasmă. A fost ales un profil de densitate  $n(x) = n_0(1 + \delta \sin 2\pi x/x_0)$  și realizate simulări pentru parametrul de modulație  $\delta$  având valorile 0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7. A fost observată evoluția energiei electronilor, care descrește odată cu creșterea modulației.

A fost realizat în continuare un model analitic pentru a calcula accelerarea electronilor în bula care are în acest caz o dimensiune variabilă și observăm că centrul ei variază între două poziții maxime, centru bulei cele mai mari la densitatea minimă și centrul bulei cele mai mici la densitatea maximă. Rezultatul a fost comparat cu energia obținută din spectrul de energie al electronilor și a arătat rezultate consistente. În continuare au fost calculate lungimile de defazare și epuizare a laserului pentru acest profil periodic de plasmă, efectuând media lui pe densitatea periodică, iar apoi a fost comparat cum variază ambele cu parametrul de modulație. A fost observat că epuizarea laserului este o limitare mult mai

puternică decât defazarea în acest caz, care este în mare parte eliminată. În calcularea atât a energiei electronilor, cât și a acestor două lungimi, a fost întâlnită o integrală specială al cărei calcul este detalia în Anexă. Aceasta are expresia, în general

$$I = \int_0^L \frac{dx}{1 + D \sin(ax)}, \quad (3.1)$$

iar pentru că și primitiva ei este tot o funcție periodică, este rezolvată prin metoda substituției cu tangenta unghiului înjumătățit, și abordăm toate aspectele ei și cazul aplicat pe care îl folosim.

Au fost de asemenea măsurate parametrii oscilației betatron în acest profil periodic de densitate. Amplitudinea de oscilație înregistrează o creștere odată cu parametrul de modulație, iar același lucru se întâmplă și pentru unghiul de emisie al radiației,  $\psi$ , și parametrul de intensitate al oscilației. Puterea și energia radiată au valori oscilante și ating valorile maxime, la  $\delta = 0.3$  în cazul energiei și  $\delta = 0.1$  în cazul puterii.

În continuare, a fost calculată emitanța transversală a electronilor injectați în toate cazurile folosind un cod în Python care a extras pozițiile verticale ( $y$ ) și componentele impulsului  $p_x$  și  $p_y$  din fișierul SDF produs de codul EPOCH. Aspectele acestui cod sunt detaliate în Anexă. Sunt filtrate datele în afara domeniului din fereastra de simulare unde calculăm emitanța și sunt extrase pozițiile verticale și componentele impulsului. Obținem ulterior cantitățile mediate, ținând cont și de ponderea particulelor care este de asemenea extrasă.

Emitanța transversală este dată de

$$\epsilon_y = \sqrt{\langle y^2 \rangle \left\langle \frac{p_y^2}{p_x^2} \right\rangle - \left\langle y \frac{p_y}{p_x} \right\rangle^2}, \quad (3.2)$$

Rezultatul emitanței și parametrilor statistici folosiți pentru calculul ei arată un mănunchi de electroni mai compact la modulație mai mare. Au fost obținuți de asemenea și parametrii Courant-Snyder pentru aceste emitanțe care o scădere a ariei în spațiul fazelor pentru emitanțele mai mici obținute la modulație mai mare.

Astfel, a fost efectuată o analiză completă a mecanismului LWFA într-o densitate periodică de plasmă, începând cu un model analitic pentru a calcula accelerația electronilor, calculând apoi lungimile de defazare și epuizare a laserului și studiind radiația betatron și emitanța mănunchiului de electroni.

## 4 Concluzii

În concluzie, scopul acestei teze a fost să prezinte o descriere exhaustivă a mecanismului de accelerare wakefield cu laser și a fenomenelor legate de acesta în special radiația emisă de electronii accelerați. A fost descrisă interacția laser-plasmă, accelerarea wakefield cu laser, radiația emisă de o sarcinile accelerate și simulările computaționale PIC care modelează această dinamică.

Au fost prezentate de asemenea și contribuțiile în literatură, începând cu optimizarea simulărilor PIC și studierea parametrilor de rețea potriviți pentru a obține valori mai precise pentru energiile electronilor și pentru a reduce resursele computaționale folosite. A fost descrisă apoi dinamica electronilor care formează bula folosind un câmp central relativist și observând diferitele geometrii la formarea acestuia. În următorul studiu, a fost analizată formarea diferită a bulei în cazul densităților diferite de plasmă, și ce impact are acest lucru asupra radiației betatron. În cel de-al patrulea a fost abordată accelerarea wakefield într-o densitate periodică de plasmă și a fost calculată accelerația electronilor în bula de dimensiuni variabile și lungimile de defazare și epuizare a laserului. De asemenea au fost studiate oscilațiile betatron și emitanța mănușii de electroni în acest regim și particularitățile lor în funcție de parametrul de modulație.

Astfel, toate acestea constituie o amplă descriere a principalelor aspecte din LWFA și simulările computaționale folosite, precum și contribuții semnificative pentru literatură.

# Bibliografie

- [1] Toshiki Tajima și John M Dawson, “Laser electron accelerator”, în *Physical review letters* 43.4 (1979), p. 267.
- [2] AA Vlasov, “On high-frequency properties of electron gas”, în *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 8.3 (1938), pp. 291–318.
- [3] Rareș Iovănescu, “Laser self-focusing in plasma with a Vlasov model”, în *Acceptat spre publicare în Rom. J. Phys.* (2025).
- [4] Kane Yee, “Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media”, în *IEEE Transactions on antennas and propagation* 14.3 (1966), pp. 302–307.
- [5] Jay P Boris et al., “Relativistic plasma simulation-optimization of a hybrid code”, în *Proc. Fourth Conf. Num. Sim. Plasmas*, 1970, pp. 3–67.
- [6] J-L Vay, “Simulation of beams or plasmas crossing at relativistic velocity”, în *Physics of Plasmas* 15.5 (2008).
- [7] Adam V Higueras și John R Cary, “Structure-preserving second-order integration of relativistic charged particle trajectories in electromagnetic fields”, în *Physics of Plasmas* 24.5 (2017).
- [8] T Zh Esirkepov, “Exact charge conservation scheme for particle-in-cell simulation with an arbitrary form-factor”, în *Computer Physics Communications* 135.2 (2001), pp. 144–153.
- [9] Alexander Pukhov, “Three-dimensional electromagnetic relativistic particle-in-cell code VLPL (Virtual Laser Plasma Lab)”, în *Journal of plasma physics* 61.3 (1999), pp. 425–433.
- [10] TD Arber et al., “Contemporary particle-in-cell approach to laser-plasma modelling”, în *Plasma Physics and Controlled Fusion* 57.11 (2015), p. 113001.
- [11] Rareș Iovănescu et al., “Optimisation of particle-in-cell simulations for laser wakefield acceleration”, în *University Politehnica of Bucharest Scientific Bulletin - Series A-Applied Mathematics and Physics* 85.1 (2023), pp. 159–166.

- [12] Alexey V Arefiev et al., “Temporal resolution criterion for correctly simulating relativistic electron motion in a high-intensity laser field”, în *Physics of plasmas* 22.1 (2015), p. 013103.
- [13] Rareş Iovănescu et al., “Electron dynamics in a relativistic central field approach associated with laser acceleration of electrons”, în *Rom. J. Phys.* 69.7-8 (2024), p. 501.
- [14] Rareş Iovănescu et al., “Electron Filament Structures of Injected Electrons in LWFA”, în *IEEE Transactions on Plasma Science* 53.4 (2025), pp. 780–787.
- [15] Rareş Iovănescu et al., “Laser wakefield electron acceleration in a periodically modulated plasma density profile”, în Trimis spre publicare în *IEEE Transactions on Plasma Science* (2025).