



# **Accélération d'électrons à l'aide d'impulsions laser ultrabrèves et fortement focalisées**

**Thèse**

**Vincent Marceau**

**Doctorat en physique**  
Philosophiæ doctor (Ph.D.)

Québec, Canada

© Vincent Marceau, 2015



# Résumé

Lorsque fortement focalisées, les impulsions laser de haute puissance génèrent des champs électromagnétiques d'amplitude gigantesque. Ces derniers peuvent être mis à profit pour accélérer des électrons à une grande énergie sur une très courte distance. Les progrès récents dans le domaine des lasers de haute puissance laissent ainsi entrevoir des perspectives excitantes dans le développement d'une nouvelle génération d'accélérateurs laser qui seraient beaucoup plus compacts et moins dispendieux que les accélérateurs d'électrons conventionnels.

Parmi les différents schémas d'accélération laser proposés, l'utilisation d'impulsions laser de polarisation radiale s'avère prometteuse. Cette méthode tire profit de la composante longitudinale du champ électrique au centre d'un faisceau laser de type  $TM_{01}$  afin d'accélérer des électrons le long de l'axe optique. L'objectif spécifique du projet de doctorat présenté dans cette thèse est d'étudier l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  dans le régime des impulsions ultrabrèves et fortement focalisées. Dans ces conditions extrêmes, les impulsions laser doivent impérativement être modélisées à l'aide de solutions exactes aux équations de Maxwell.

Nous présentons d'abord une technique permettant d'obtenir une solution exacte sous forme fermée aux équations de Maxwell pour décrire le champ électromagnétique de l'impulsion  $TM_{01}$ . Cette solution exacte nous permet de modéliser rigoureusement la dynamique en régime d'impulsions ultrabrèves et fortement focalisées et d'en faire ressortir les caractéristiques intéressantes. Il est également mis en évidence qu'une solution exacte pour le champ électromagnétique n'est pas seulement utile en régime non paraxial, mais qu'elle est également nécessaire pour modéliser correctement la dynamique dans des conditions de faible focalisation.

Une partie de cette thèse s'intéresse finalement à une application intéressante de l'accélération par impulsions  $TM_{01}$  ultrabrèves et fortement focalisées, soit la production d'impulsions ultrabrèves d'électrons sous-relativistes. À l'aide de simulations *particle-in-cell*, nous démontrons la possibilité d'accélérer des impulsions d'électrons d'une durée de l'ordre de la femtoseconde à quelques centaines de keV d'énergie lorsqu'une impulsion  $TM_{01}$  de quelques centaines de gigawatts est focalisée dans un gaz de faible densité. Étant situées dans la fenêtre énergétique adéquate, ces impulsions d'électrons pourraient permettre d'améliorer significativement la résolution temporelle dans les expériences d'imagerie atomique et moléculaire par diffraction électronique ultrarapide.



# Abstract

When focused on a tiny spot, high-power laser pulses generate gigantic electromagnetic fields. Under these strong field conditions, charged particles can be accelerated up to high energies over short distances. Recent advances in high-power laser technology hint at exciting new possibilities in the development of a new generation of laser-driven electron accelerators that are expected to offer a robust, compact, and low-cost alternative to conventional linear accelerators.

Among the many proposed laser-driven acceleration schemes, the use of radially polarized laser pulses is very promising. In this method, the electrons are accelerated along the optical axis by the strong longitudinal electric field component at the center of a  $TM_{01}$  beam. The main objective of this thesis is to investigate electron acceleration driven by  $TM_{01}$  pulses under ultrashort pulse and strong focusing conditions. In this nonparaxial and ultrashort pulse regime, the laser pulses must be rigorously modeled as exact solutions to Maxwell's equations.

We first present the tools that are used to obtain an exact closed-form solution to Maxwell's equations for a  $TM_{01}$  pulse. This exact solution allows us to accurately model the acceleration process and to highlight several interesting properties of the dynamics in the nonparaxial and ultrashort pulse regime. It is also shown that an exact solution is not only useful to investigate electron acceleration under nonparaxial conditions, but also necessary to correctly describe the dynamics in the weak focusing limit.

A part of this thesis is also concerned with an interesting property of the acceleration driven by ultrashort and tightly focused  $TM_{01}$  pulses, namely the generation of ultrashort bunches of subrelativistic electrons. Using particle-in-cell simulations, we demonstrate the possibility of generating one-femtosecond electron pulses at few-hundred-keV energies when a few-hundred-GW  $TM_{01}$  pulse is tightly focused in a low-density gas. Since they are located in the appropriate energy window, these electron pulses could potentially lead to a significant improvement in the time resolution of atomic and molecular imaging experiments based on ultrafast electron diffraction.



# Table des matières

<b>Résumé</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>v</b>
<b>Table des matières</b>	<b>vii</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>xi</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>xiii</b>
<b>Notation et abréviations</b>	<b>xvii</b>
<b>Remerciements</b>	<b>xxv</b>
<b>Avant-propos</b>	<b>xxvii</b>
<b>Contributions</b>	<b>xxix</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>1</b>
1.1 Accélération d'électrons par laser : un survol . . . . .	2
1.2 Accélération d'électrons par impulsions laser de polarisation radiale . . . . .	4
1.3 À propos de cette thèse . . . . .	6
<b>2 Notions préliminaires, partie I : théorie</b>	<b>11</b>
2.1 Électrodynamique classique relativiste . . . . .	11
2.1.1 Équations de Maxwell . . . . .	11
2.1.2 Force de Lorentz . . . . .	12
2.1.3 Émission de radiation et validité du cadre théorique . . . . .	13
2.1.4 Le théorème de Lawson-Woodward . . . . .	16
2.1.5 Le cas particulier de l'onde plane de durée finie . . . . .	17
2.2 L'impulsion $TM_{01}$ paraxiale . . . . .	19
2.2.1 La méthode des vecteurs de Hertz . . . . .	20
2.2.2 L'approximation paraxiale et l'approximation de l'enveloppe lente . . . . .	21
2.2.3 Champ électromagnétique de l'impulsion $TM_{01}$ paraxiale . . . . .	22
2.2.4 Génération expérimentale d'un faisceau $TM_{01}$ . . . . .	25
2.3 L'impulsion $TM_{01}$ exacte . . . . .	26
2.3.1 Modèle des source/puits ponctuels complexes . . . . .	27
2.3.2 Le spectre de Poisson . . . . .	29
2.3.3 Champ électromagnétique de l'impulsion $TM_{01}$ exacte . . . . .	30

2.3.4	Limite monochromatique . . . . .	32
2.4	Théorie de l'accélération d'électrons par impulsions $TM_{01}$ . . . . .	34
2.4.1	Équations du mouvement . . . . .	35
2.4.2	Accélération sous-cycle . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Notions préliminaires, partie II : simulations numériques</b>	<b>39</b>
3.1	Simulations à un électron . . . . .	39
3.2	Simulations particle-in-cell . . . . .	40
3.2.1	Mise en contexte : théorie de l'interaction rayonnement-matière . . . . .	41
3.2.2	La méthode particle-in-cell . . . . .	44
3.2.3	Le code Epoch . . . . .	45
3.2.4	Une itération typique dans Epoch . . . . .	46
3.3	Fonctionnement d'Epoch, partie I : champ électromagnétique . . . . .	47
3.3.1	Algorithme de Yee . . . . .	47
3.3.2	Conditions aux frontières absorbantes . . . . .	49
3.3.3	Champ incident . . . . .	51
3.4	Fonctionnement d'Epoch, partie II : particules . . . . .	52
3.4.1	Résolution des équations du mouvement . . . . .	52
3.4.2	Densité de charges et courant . . . . .	55
3.4.3	Ionisation . . . . .	56
<b>4</b>	<b>Accélération d'un électron sur l'axe optique</b>	<b>61</b>
4.1	Avant-propos . . . . .	62
4.2	Résumé . . . . .	62
4.3	Abstract . . . . .	63
4.4	Introduction . . . . .	63
4.5	Ultrashort and tightly focused $TM_{01}$ pulses . . . . .	64
4.6	Electron acceleration in the ultrashort and nonparaxial regime . . . . .	65
4.7	Conclusion . . . . .	67
4.8	Complément I : Champ électromagnétique de l'impulsion $TM_{01}$ dans la limite $k_0 a \gg 1$ et $s \gg 1$ . . . . .	68
4.9	Complément II : Indépendance sur la longueur d'onde . . . . .	70
4.10	Complément III : Optimisation du gain en énergie . . . . .	73
4.11	Complément IV : Régimes d'accélération . . . . .	74
4.12	Complément V : Accélération contra-directionnelle . . . . .	76
<b>5</b>	<b>Validité de l'approximation paraxiale</b>	<b>79</b>
5.1	Avant-propos . . . . .	80
5.2	Résumé . . . . .	80
5.3	Abstract . . . . .	80
5.4	Introduction . . . . .	81
5.5	From exact to paraxial $TM_{01}$ beams . . . . .	81
5.6	An ultrarelativistic case study . . . . .	82
5.7	Conclusion . . . . .	86
5.8	Complément I : Développement en série de perturbations . . . . .	86
5.8.1	Champ électrique radial $\tilde{E}_r$ . . . . .	87
5.8.2	Champ électrique longitudinal $\tilde{E}_z$ . . . . .	88
5.8.3	Champ magnétique azimutal $\tilde{B}_\phi$ . . . . .	90



5.8.4	Connexion avec les travaux de Salamin . . . . .	91
5.9	Complément II : Remarques supplémentaires sur l'approximation paraxiale . . . . .	91
5.9.1	L'approximation paraxiale sur l'axe optique . . . . .	92
5.9.2	L'approximation paraxiale en régime non relativiste . . . . .	92
5.9.3	À quelle valeur de $k_0a$ l'approximation paraxiale devient-elle valide ? . . . . .	94
5.10	Complément III : L'approximation de l'enveloppe lente . . . . .	96
<b>6</b>	<b>Génération d'impulsions d'électrons ultrabrèves, partie I : preuve de concept</b>	<b>101</b>
6.1	Avant-propos . . . . .	102
6.2	Résumé . . . . .	103
6.3	Abstract . . . . .	103
6.4	Introduction . . . . .	103
6.5	Numerical model . . . . .	104
6.6	Generation of ultrashort electron pulses . . . . .	106
6.6.1	Test-particle simulations . . . . .	106
6.6.2	Three-dimensional particle-in-cell simulations . . . . .	108
6.7	Discussion . . . . .	109
6.8	Complément I : Remarques supplémentaires sur les simulations numériques . . . . .	110
6.9	Complément II : Diffraction électronique ultrarapide . . . . .	112
6.9.1	Électrons et rayons X . . . . .	113
6.9.2	Diffraction électronique ultrarapide : principe et instrumentation . . . . .	114
6.9.3	Un exemple : la fusion de l'aluminium . . . . .	116
<b>7</b>	<b>Génération d'impulsions d'électrons ultrabrèves, partie II : accordabilité</b>	<b>119</b>
7.1	Avant-propos . . . . .	120
7.2	Résumé . . . . .	120
7.3	Abstract . . . . .	120
7.4	Introduction . . . . .	120
7.5	Numerical simulations . . . . .	122
7.5.1	Exact solution of a radially polarized $TM_{01}$ pulse . . . . .	123
7.5.2	Three-dimensional particle-in-cell simulations . . . . .	124
7.6	Influence of the laser parameters on the electron bunch properties . . . . .	125
7.6.1	Test-particle simulations . . . . .	126
7.6.2	Optimized case studies with hydrogen and heavier species . . . . .	129
7.7	Application to ultrafast electron diffraction experiments . . . . .	133
7.8	Conclusion . . . . .	136
7.9	Complément I : Résultats à plus grande longueur d'onde . . . . .	137
<b>8</b>	<b>Conclusion</b>	<b>139</b>
8.1	Contributions . . . . .	139
8.2	Perspectives . . . . .	142
	<b>Bibliographie</b>	<b>145</b>



# Liste des tableaux

1	Constantes physiques (à trois décimales de précision) . . . . .	xvii
2	Fonctions spéciales. . . . .	xviii
3	Notation pour les coordonnées. . . . .	xviii
4	Notation pour les particules. . . . .	xviii
5	Notation pour le champ électromagnétique. . . . .	xix
6	Abréviations utilisées. . . . .	xx



# Liste des figures

1.1	Représentation schématique de l'accélération d'un électron par une impulsion $TM_{01}$ ultrabrève. . . . .	5
2.1	Impulsion $TM_{01}$ paraxiale avec $k_0 z_R = 150$ . . . . .	24
2.2	Principe de fonctionnement d'un convertisseur de polarisation à lames demi-onde . . .	26
2.3	Spectre de Poisson et profil temporel pour différentes valeurs du paramètre $s$ . . . . .	29
2.4	Densité d'énergie électrique d'une impulsion $TM_{01}$ non paraxiale sous différentes conditions de focalisation. . . . .	31
2.5	Champ électrique longitudinal $E_z$ d'une impulsion $TM_{01}$ ultrabrève et non paraxiale avec $k_0 a = 1$ et $s = 10$ lorsque $t < 0$ , $t = 0$ et $t > 0$ . . . . .	32
2.6	Déphasage de Gouy du faisceau $TM_{01}$ non paraxial pour différentes valeurs de $k_0 a$ . . .	34
2.7	Illustration des trois régimes d'accélération . . . . .	36
3.1	Illustration des trois régimes de la physique des plasmas dans le plan $(T, n_e)$ . . . . .	41
3.2	Illustration schématique des différents niveaux d'approximation intervenant dans la description de la dynamique laser-plasma. . . . .	43
3.3	Évolution et dépendances des quantités dans le code Epoch. . . . .	46
3.4	Disposition des composantes du champ électromagnétique dans le cube de Yee. . . . .	47
3.5	Représentation schématique du domaine de simulation lors de la modélisation d'un espace infini en deux dimensions. . . . .	50
3.6	Exemple en une dimension de la fonction de poids utilisé pour l'interpolation des champs dans Epoch. . . . .	54
3.7	Illustration schématique de l'ionisation multiphotonique, tunnel et par suppression de barrière. . . . .	56
4.1	Gain en énergie maximal d'un électron initialement au repos sur l'axe optique en fonction de la puissance laser pour différentes combinaisons de la taille du faisceau et de la durée de l'impulsion. . . . .	63
4.2	Maximum normalized and absolute energy gain of an electron initially at rest on the optical axis versus the laser pulse power for different values of $k_0 a$ and $s$ . . . . .	65
4.3	Longitudinal on-axis electric field at pulse peak $t = z/c$ (computed for $\lambda_0 = 800$ nm) versus distance from beam waist for different values of $k_0 a$ . . . . .	66
4.4	Energy gain versus distance from beam waist for an electron accelerated by pulses of various durations with $k_0 a = 5$ , $P = 2.5 \times 10^{15}$ W. . . . .	67
4.5	Comparaison entre le champ électromagnétique de l'impulsion $TM_{01}$ issu de la solution exacte et celui issu de la solution paraxiale avec enveloppe gaussienne. . . . .	71
4.6	Optimisation du gain en énergie de l'électron en fonction de sa position initiale sur l'axe optique et de la phase de l'impulsion laser. . . . .	73

4.7	Illustration de la transition entre les régimes non relativiste, relativiste et ultra-relativiste.	75
4.8	Accélération d'électrons contra-directionnelle. . . . .	77
5.1	Snapshot of the initial electron bunch. . . . .	83
5.2	Electron bunch accelerated by a $TM_{01}$ pulsed beam with $P = 10^{15}$ W, $k_0a = 500$ , $\xi_0 = 14.21$ , $\phi_0 = \pi$ . The simulation was performed with: (i) the exact fields, (ii) the paraxial fields, and (iii) the corrected paraxial fields up to $\mathcal{O}(\delta^3)$ . . . . .	84
5.3	Normalized amplitude of $-eE_z$ and $-e(E_r - cB_\phi)$ at $t = 0$ (exact fields). . . . .	85
5.4	Accélération d'un nuage linéaire d'électrons confinés à l'axe optique. . . . .	92
5.5	Reprise du scénario présenté à la figure 5.2 à de plus faibles puissances laser. . . . .	93
5.6	Reprise du scénario présenté à la figure 5.2 avec $k_0a = 10^4$ et $P = 5 \times 10^{16}$ W. . . . .	95
5.7	Analyse de l'effet de l'approximation de l'enveloppe lente sur l'accélération d'un nuage d'électrons par une impulsion $TM_{01}$ . . . . .	97
5.8	Comparaison entre l'amplitude du champ électrique longitudinal issu de l'impulsion $TM_{01}$ exacte avec spectre de Poisson et celui issu de l'approximation de l'enveloppe lente avec enveloppe gaussienne. . . . .	98
5.9	Trajectoire d'un électron initialement au repos à l'origine pour le cas à $P = 10^{16}$ W considéré à la figure 5.7. . . . .	99
6.1	Electric field of a $TM_{01}$ pulse with $k_0a = 20$ , $s = 70$ , $P = 300$ GW, and $\lambda_0 = 800$ nm.	106
6.2	Characterization of an ultrashort electron bunch produced after the interaction of a $k_0a = 20$ , $s = 70$ , $P = 300$ GW, $\phi_0 = \pi$ laser pulse with a target of free and noninteracting electrons. . . . .	107
6.3	Final $x$ coordinate and final kinetic energy at time $t - t_0 = 120$ fs for a free electron initially at rest at the position $(x_0, z_0)$ in the $(x, z)$ plane. . . . .	108
6.4	Three-dimensional particle-in-cell simulation corresponding to the case shown in Fig. 6.2. The target consists of neutral hydrogen with a uniform density of $n_0 = 3 \times 10^{22}$ m $^{-3}$ .	109
6.5	Impact de la résolution de la grille numérique sur les résultats de la simulation PIC présentée à la figure 6.4(a)–(d). . . . .	111
6.6	Représentation schématique d'un montage de diffraction électronique ultrarapide avec un accélérateur dc. . . . .	115
6.7	Vision à l'échelle atomique de la fusion de l'aluminium polycristallin induite par une impulsion laser femtoseconde. . . . .	117
7.1	Schematic illustration of the acceleration scheme. . . . .	123
7.2	Spatiotemporal profile of some $TM_{01}$ pulses used in the simulations. . . . .	125
7.3	Electron bunches produced after the interaction of a $P = 300$ GW, $k_0a = 20$ , and $s = 70$ laser pulse with a target of free and noninteracting electrons (test-particle simulations). . . . .	126
7.4	Variation of the position of the main peak of the kinetic energy distribution, its FWHM width, and the estimated bunch charge as a function of the laser pulse phase $\phi_0$ . . . . .	127
7.5	Variation of the position of the main peak of the kinetic energy distribution and its FWHM width as well as the estimated bunch charge and its FWHM pulse duration as a function of laser power. . . . .	128
7.6	Variation of the position of the main peak of the kinetic energy distribution and its FWHM width as well as the estimated bunch charge and its FWHM pulse duration as a function of the spectral width parameter $s$ . . . . .	128

7.7	Variation of the position of the main peak of the kinetic energy distribution and its FWHM width as well as the estimated bunch charge and its FWHM pulse duration as a function of the normalized confocal parameter $k_0a$ . . . . .	129
7.8	Optimized case studies with hydrogen: characterization of the ultrashort electron bunches produced at $P = 150$ GW, 300 GW, and 600 GW. . . . .	130
7.9	Normalized (a) longitudinal and (b) transverse phase space distribution functions of the electron bunch obtained at $P = 300$ GW and shown in figure 7.8(e)–(h). . . . .	131
7.10	Variation of the position of the main peak of the kinetic energy distribution and its FWHM width as well as the estimated bunch charge and its FWHM pulse duration as a function of the initial hydrogen density $n_0$ . . . . .	132
7.11	Optimized case studies with helium and oxygen targets of density $n_0 = 3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ at laser power $P = 600$ GW. . . . .	132
7.12	Coherence lengths and number of electrons in the three bunches shown in figure 7.8 after being filtered by a pinhole, placed in the far field. An aperture with a small acceptance angle filters the most divergent electrons and, in turn, can increase the coherence length beyond the lower limit for UED ( $\sim 1$ nm). . . . .	134
7.13	Time evolution of the pulse duration and transverse FWHM width for the three bunches shown in figure 7.8 as they propagate freely for 1 ps. . . . .	136
7.14	Impulsion d'électrons produite par l'interaction d'une impulsion $\text{TM}_{01}$ caractérisée par $\lambda_0 = 1.5 \mu\text{m}$ , $P = 300$ GW, $k_0a = 20$ , $s = 70$ et $\phi_0 = 22\pi/20$ avec une cible de densité $n_0 = 2 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . . . . .	138





# Notation et abréviations

La théorie présentée dans cette thèse utilise le Système International d'unités (unités SI), sauf lorsque cela est explicitement mentionné. L'intensité laser est exprimée en watt par centimètre carré ( $\text{W}/\text{cm}^2$ ) étant donné l'universalité de cette convention dans la littérature.

Les tableaux suivants offrent une liste des symboles et des abréviations les plus fréquemment utilisés dans la thèse. On remarquera qu'exceptionnellement, certains symboles sont utilisés pour représenter deux quantités différentes <sup>1</sup>. Pour ces quelques cas, le texte est rédigé de façon à ce qu'il n'y ait aucune confusion possible.

Symbole	Valeur	Signification
$c$	$2.998 \times 10^8$ m/s	Vitesse de la lumière dans le vide
$\epsilon_0$	$8.854 \times 10^{-12}$ F/m	Permittivité du vide
$\mu_0$	$4\pi \times 10^{-7}$ N/A <sup>2</sup>	Perméabilité du vide
$\eta_0$	$3.767 \times 10^2$ $\Omega$	Impédance du vide
$e$	$1.602 \times 10^{-19}$ C	Charge élémentaire
$m_e$	$9.109 \times 10^{-31}$ kg	Masse de l'électron
$m_p$	$1.673 \times 10^{-27}$ kg	Masse du proton
$k_B$	$1.381 \times 10^{-23}$ J/K	Constante de Boltzmann
$\hbar$	$1.055 \times 10^{-34}$ J·s	Constante de Planck

Tableau 1 – Constantes physiques (à trois décimales de précision).

1. Par exemple, le symbole  $\rho$  est utilisé pour représenter la densité de charge ainsi que la coordonnée radiale normalisée. Ces deux quantités sont cependant utilisées dans des contextes très différents, ce qui prévient toute confusion possible.

Symbole	Signification
$\delta(x)$	Fonction delta de Dirac
$\Gamma(x)$	Fonction gamma
$H(x)$	Fonction de Heaviside
$j_n(x)$	Fonction de Bessel sphérique de première espèce d'ordre $n$
$P_n(x)$	Polynôme de Legendre d'ordre $n$

Tableau 2 – Fonctions spéciales.

Symbole	Signification
$x, y, z$	Coordonnées cartésiennes
$r, \phi, z$	Coordonnées cylindriques
$\rho, \zeta$	Coordonnées radiale et axiale sans dimension
$\hat{\mathbf{e}}_x, \hat{\mathbf{e}}_y, \hat{\mathbf{e}}_z$	Vecteurs unitaires cartésiens
$t$	Temps
$\tau$	Temps sans dimension

Tableau 3 – Notation pour les coordonnées.

Symbole	Signification
$\mathbf{r}$	Vecteur position
$\mathbf{v}$	Vecteur vitesse
$\beta$	Vecteur vitesse normalisé par $c$
$\mathbf{p}$	Vecteur impulsion
$\gamma$	Facteur relativiste gamma
$\mathbf{F}_L$	Force de Lorentz
$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$	Fonction de distribution à une particule
$n$	Densité
$T$	Température
$W$	Énergie
$\Delta W$	Gain en énergie
$\epsilon_n$	Émittance normalisée
$L_T$	Longueur de cohérence transverse
$L_z$	Longueur de cohérence longitudinale
$I_p$	Énergie d'ionisation

Tableau 4 – Notation pour les particules.

Symbole	Signification
$i$	Unité imaginaire ( $\sqrt{-1}$ )
$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$	Champ électrique
$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$	Champ magnétique
$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$	Densité de courant
$\rho(\mathbf{r}, t)$	Densité de charge
$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$	Potentiel vecteur magnétique
$\mathbf{\Pi}_e(\mathbf{r}, t)$	Vecteur de Hertz électrique
$\mathbf{\Pi}_m(\mathbf{r}, t)$	Vecteur de Hertz magnétique
$\mathbf{S}_{av}(\mathbf{r}, t)$	Vecteur de Poynting moyenné dans le temps
$w_e(\mathbf{r}, t)$	Densité d'énergie électrique
$a_0$	Paramètre d'intensité électromagnétique
$a_z$	Paramètre d'intensité longitudinale
$P$	Puissance
$\lambda$	Longueur d'onde de la composante spectrale
$k$	Nombre d'onde de la composante spectrale
$\omega$	Fréquence angulaire de la composante spectrale
$a$	Paramètre confocal
$s$	Paramètre de largeur spectrale
$\phi_0$	Constante de phase
$w_0$	Taille à l'étranglement
$z_R$	Distance de Rayleigh
$\Psi_0$	Paramètre d'amplitude
$F(\omega)$	Spectre en fréquences
$f(t)$	Forme temporelle de l'impulsion
$\tilde{t}_{\pm}(\mathbf{r}, t)$	Temps complexe retardé
$\tilde{R}(\mathbf{r}), \tilde{\theta}(\mathbf{r})$	Rayon et angle complexes
$v_{ph}(z)$	Vitesse de phase axiale
$\Phi_G(z)$	Déphasage de Gouy
$\xi(z, t)$	Phase spatiotemporelle
$T$	Paramètre de durée de l'impulsion gaussienne
$\xi_0$	Paramètre de durée de l'impulsion en sécante hyperbolique
$T_{1/e}$	Durée 1/e
$T_{fwhm}$	Durée largeur totale à mi-hauteur
$\Delta t, \Delta x, \Delta y, \Delta z$	Discretisation spatiotemporelle

Tableau 5 – Notation pour le champ électromagnétique.

Abréviation	Signification (français)	Signification (anglais)
ADK	Ammosov-Delone-Krainov	<i>Ammosov-Delone-Krainov</i>
cw	Signal continu	<i>Continuous wave</i>
dc	De fréquence nulle	<i>Direct current</i>
DLA	Accélérateur laser diélectrique	<i>Dielectric laser accelerator</i>
FDTD	Différences finies dans le domaine temporel	<i>Finite-difference time-domain</i>
FWHM	Largeur totale à mi-hauteur	<i>Full width at half maximum</i>
PIC	Particle-in-cell	<i>Particle-in-cell</i>
PML	Couche parfaitement adaptée	<i>Perfectly matched layer</i>
rf	Fréquence radio	<i>Radio-frequency</i>
SFF	Formulation par champ diffusé	<i>Scattered-field formulation</i>
TE	Transverse électrique	<i>Transverse electric</i>
TM	Transverse magnétique	<i>Transverse magnetic</i>
UED	Diffraction électronique ultrarapide	<i>Ultrafast electron diffraction</i>

Tableau 6 – Abréviations utilisées. Dans tous les cas, l’acronyme provient de l’anglais.

*À Julie,  
Céline, Louis-André et Julien*



“The longer and farther I ran, the more I realized that what I was often chasing was a state of mind – a place where worries that seemed monumental melted away, where the beauty and timelessness of the universe, of the present moment, came into sharp focus.”

---

– Scott Jurek

*Eat and Run : My Unlikely Journey  
to Ultramarathon Greatness.*



ANNÉE INTERNATIONALE  
DE LA LUMIÈRE  
2015





# Remerciements

La réalisation d'un projet de doctorat ne saurait être l'oeuvre d'un seul individu. Bien que la page couverture de cette thèse ne porte qu'un seul nom, son contenu représente une grande mosaïque à laquelle plusieurs personnes ont contribué en y laissant leur touche personnelle, parfois directement, parfois indirectement. J'aimerais profiter de cette section pour les remercier.

J'aimerais en premier lieu remercier mon directeur de recherche, le Prof. Michel Piché, pour m'avoir fait confiance et m'avoir accepté comme étudiant au doctorat alors que je n'avais aucune connaissance du vaste monde de l'optique et de la science des lasers. Par sa curiosité et son imagination sans limite, son intuition remarquable, son érudition et sa grande humilité, il a été pour moi une source constante d'inspiration et de dépassement. Je le remercie d'avoir veillé, par sa supervision, ses conseils et ses enseignements, à faire de moi un meilleur scientifique pendant mon cheminement doctoral. Je n'ai aucun doute que les qualités et les valeurs que j'ai pu développer à ses côtés me suivront toute ma vie, et pour cela je lui serai éternellement reconnaissant.

J'aimerais également adresser des remerciements spéciaux au Prof. Louis Dubé. En plus d'avoir accepté d'être à la fois prélecteur et évaluateur de cette thèse, je lui suis reconnaissant pour sa très grande contribution, tout au long de mon parcours universitaire, à mon éducation scientifique. En plus d'avoir guidé mes premiers pas sur la berge du ravin de la connaissance, il a su me transmettre son enthousiasme pour la science, son optimisme, sa rigueur ainsi que son sens de l'humour. Ses enseignements figurent eux-aussi au palmarès de ceux qui me seront les plus utiles dans la vie.

Je remercie le Prof. Bernd Witzel pour avoir accepté d'être évaluateur de cette thèse ainsi que pour les nombreuses discussions à propos des lasers de haute puissance. Merci également au Prof. Jean-Claude Kieffer de l'INRS pour avoir accepté d'agir à titre de membre externe de mon comité d'évaluation. J'ai une grande estime pour les travaux réalisés au cours des dernières années par son équipe dans le domaine de l'accélération de particules. Je lui suis reconnaissant de m'avoir permis de visiter le laboratoire ALLS ainsi que de l'intérêt qu'il a toujours démontré envers mes travaux.

J'aimerais remercier spécialement une membre du corps professoral de l'Université Laval, soit la Prof. Claudine Allen, avec qui j'ai eu beaucoup de plaisir à travailler comme auxiliaire d'enseignement pour le cours de Physique Mathématique II.

Dans le cadre de mes travaux de doctorat, j'ai eu l'immense chance de bénéficier de l'enseignement

de deux *grands frères* scientifiques pour lesquels j'ai une très grande estime, soit Alexandre April et Charles Varin. Chacun à leur manière, ils ont su me guider dans des moments importants du projet et ont été une constante source de dépassement. À la fin de ces quelques années de recherche, je peux affirmer que ma plus grande fierté est d'avoir pu donner une suite à leurs travaux. Je remercie Alexandre pour les multiples discussions à propos de la modélisation d'impulsions laser, ainsi que pour sa collaboration au premier article qui a vu le jour pendant mon doctorat. La liste des choses pour lesquelles j'aimerais remercier Charles est beaucoup trop longue pour être énumérée ici ; entre autres choses, je le remercie pour sa précieuse collaboration à plusieurs articles, pour m'avoir initié aux simulations *particle-in-cell*, pour avoir répondu, souvent dans un temps record, à mes nombreuses questions et pour avoir su me rassurer dans quelques moments de panique. Je garderai un précieux souvenir de notre collaboration.

J'aimerais remercier Pascal Hogan-Lamarre, un étudiant curieux et passionné, qui prend la relève de l'axe de recherche sur l'accélération d'électrons au sein du groupe du Prof. Piché. Je lui souhaite beaucoup de succès dans la suite de son cheminement universitaire. Je remercie également Stéphane Payeur et Sylvain Fourmaux du laboratoire ALLS de l'INRS pour les discussions stimulantes à propos de l'accélération d'électrons par laser.

J'aimerais exprimer ma gratitude envers plusieurs individus pour avoir rendu mon séjour au Centre d'optique, photonique et laser des plus agréables au quotidien. Je garderai un souvenir impérissable de mes amis du bureau 2177 : ma partenaire de course Véronique, Gabrielle, Denis, Jean-François, Pascal, ainsi que mon correspondant téléphonique Étienne. Merci également à mes amis Anne-Sophie, Simon, Olivier, Mathieu, Adil, Marie, Pierre, Clément, Nicolas, Jérôme, Jean, Michel Olivier, aux membres des groupes McCarthy-Piché, à la gang du REPOL, ainsi qu'aux nombreux participants des clubs de course à pied, de natation et de patin du COPL. J'aimerais également adresser des remerciements spéciaux à Diane Déziel, une fidèle partenaire de course dont la bonne humeur contagieuse rend la vie au COPL des plus dynamiques.

Sur un plan plus personnel, j'aimerais remercier mes parents, Louis-André et Céline, ainsi que mon frère Julien, qui m'ont toujours encouragé dans la poursuite de mes études universitaires. Je remercie également mes amis, qui sauront sans nul doute se reconnaître, pour m'avoir permis de conserver une vie équilibrée tout au long de mes études. Finalement, je remercie de tout mon coeur ma copine Julie pour son amour inconditionnel et son support tout au long de cette aventure, particulièrement en cette période intense où fin des études doctorales et début d'un emploi en milieu industriel se sont superposés.

Sincèrement, merci.

Vincent Marceau  
Québec, mai 2015.

# Avant-propos

Cette thèse contient les résultats principaux des recherches réalisées entre septembre 2011 et novembre 2014 dans le cadre de mon doctorat en physique sous la direction du Prof. Michel Piché à l'Université Laval. Ces résultats sont en grande partie présentés sous la forme de quatre articles insérés dans cet ouvrage :

1. V. Marceau, A. April et M. Piché, *Electron acceleration driven by ultrashort and nonparaxial radially polarized laser pulses*, Opt. Lett. 37, 2442–2444 (2012).
2. V. Marceau, C. Varin et M. Piché, *Validity of the paraxial approximation for electron acceleration with radially polarized laser beams*, Opt. Lett. 38, 821–823 (2013).
3. V. Marceau, C. Varin, T. Brabec et M. Piché, *Femtosecond 240-keV electron pulses from direct laser acceleration in a low-density gas*, Phys. Rev. Lett. 111, 224801 (2013).
4. V. Marceau, P. Hogan-Lamarre, T. Brabec, M. Piché et C. Varin, *Tunable high-repetition-rate femtosecond few-hundred-keV electron source*, J. Phys. B 48, 045601 (2015).

Ces quatre publications sont les résultats de collaborations effectuées avec mes prédécesseurs Alexandre April (enseignant au cégep F.-X.-Garneau) et Charles Varin (assistant de recherche à l'Université d'Ottawa), avec Pascal Hogan-Lamarre (étudiant à la maîtrise), ainsi qu'avec les professeurs Thomas Brabec (Université d'Ottawa) et Michel Piché, mon directeur de recherche.

En tant que premier auteur de tous ces articles, j'ai occupé le rôle principal à tous les niveaux de chaque publication, allant de sa conception à sa rédaction, en passant par la réalisation des simulations numériques et l'analyse des résultats. Toutes ces étapes ont été réalisées avec l'aide des précieuses idées et suggestions de tous les coauteurs.

Pour chaque article, la version qui apparaît dans cet ouvrage diffère très légèrement de la version originale. Des modifications mineures au texte et à la notation ont été effectuées dans chaque article dans le souci d'uniformiser autant que possible la thèse. Une figure explicative supplémentaire a été ajoutée à l'article 2 afin d'en faciliter la compréhension. Une sous-figure illustrant la cohérence longitudinale a également été ajoutée à l'article 4. Par ailleurs, il est à noter qu'en raison du processus d'insertion d'articles, certaines notions importantes sont répétées à plus d'un endroit dans la thèse. Cela a toutefois pour avantage de faire en sorte que chaque chapitre puisse être lu et compris indépendamment.



# Contributions

## Journaux scientifiques

- *Electron acceleration driven by ultrashort and nonparaxial radially polarized laser pulses*<sup>2</sup>  
**V. Marceau**, A. April et M. Piché  
Optics Letters 37, 2442–2444 (2012).  
Inséré au chapitre 4.
- *Validity of the paraxial approximation for electron acceleration with radially polarized laser beams*  
**V. Marceau**, C. Varin et M. Piché  
Optics Letters 38, 821–823 (2013).  
Inséré au chapitre 5.
- *Review : Direct electron acceleration with radially polarized laser beams*  
C. Varin, S. Payeur, **V. Marceau**, S. Fourmaux, A. April, B. Schmidt, P.-L. Fortin, N. Thiré, T. Brabec, F. Légaré, J.-C. Kieffer et M. Piché  
Applied Sciences 3, 70–93 (2013).
- *Femtosecond 240-keV electron pulses from direct acceleration in a low-density gas*<sup>3</sup>  
**V. Marceau**, C. Varin, T. Brabec et M. Piché  
Physical Review Letters 111, 224801 (2013).  
Inséré au chapitre 6.
- *Tunable high-repetition-rate femtosecond few-hundred-keV electron source*  
**V. Marceau**, P. Hogan-Lamarre, T. Brabec, M. Piché et C. Varin  
Journal of Physics B 48, 045601 (2015).  
Inséré au chapitre 7.

---

2. Sélectionné pour le supplément *Spotlight on Optics* de l'Optical Society of America (juin 2012).

3. Sélectionné pour le prix Étudiant-chercheur-étoile du Fonds de Recherche du Québec (août 2014).

## Conférences internationales et actes de colloques

(sélection, le nom du présentateur est souligné, un titre est parfois associé à plusieurs présentations)

- *Electron acceleration in vacuum by ultrashort and tightly focused radially polarized laser pulses*  
**V. Marceau**, A. April et M. Piché
  - Présentation par affiche, Photonics North, Montréal, Canada (2012).
  - Présentation par affiche, Ultrafast Phenomena XVIII, Lausanne, Suisse (2012).
  - Acte de colloque : Ultrafast Phenomena XVIII, EPJ Web of Conferences 41, 02007 (2013).
- *Validity of the paraxial approximation for electron acceleration with radially polarized laser beams*  
**V. Marceau**, C. Varin et M. Piché
  - Présentation orale, 44th Annual DAMOP Meeting, Québec, Canada (2013).
  - Présentation par affiche, S. L. Chin International Symposium on Ultrafast Intense Lasers, Québec, Canada (2013).
- *Generating ultrashort hundreds-of-keV electron bunches using radially polarized laser pulses*  
**V. Marceau**, C. Varin, T. Brabec et M. Piché
  - Présentation orale, CLEO Conference, San Jose, États-Unis (2014).
  - Acte de colloque : CLEO 2014, OSA Technical Digest (en ligne), FM1B.5 (2014).
- *Femtosecond few-hundred-keV electron pulses from direct laser acceleration in a low-density gas*  
**V. Marceau**, **C. Varin**, T. Brabec et M. Piché
  - Présentation orale, 45th Annual DAMOP Meeting, Madison, États-Unis (2014).
  - Présentation orale invitée, CAP Annual Meeting, Sudbury, Canada (2014).

## Arbitrage

Au cours de mon doctorat, j'ai eu l'occasion d'arbitrer cinq articles scientifiques pour les journaux *Optics Express*, *Journal of the Optical Society of America B* et *Canadian Journal of Physics*.

# Chapitre 1

## Introduction

Avec la découverte de l'amplification par glissement en fréquence (*chirped pulse amplification*) en 1985 [158], les trente dernières années ont été témoins d'une série de progrès dans le développement des lasers de haute puissance. Il existe aujourd'hui des lasers capables de générer des impulsions d'une durée de quelques cycles optiques dont la puissance atteint des valeurs records de l'ordre de  $3 \times 10^{14}$  W [190]. Lorsque fortement focalisées, de telles impulsions produisent une intensité avoisinant  $10^{22}$  W/cm<sup>2</sup> au point focal, ce qui correspond à un champ électrique de l'ordre de  $10^{14}$  V/m, une valeur près de trois ordres de grandeur au-delà de l'unité atomique de champ électrique ( $5 \times 10^{11}$  V/m). Soumise à de telles intensités laser, la matière est ainsi rapidement ionisée et les particules chargées résultantes subissent des forces accélératrices énormes.

Les champs électromagnétiques gigantesques générés par les lasers de haute puissance laissent entrevoir une application intéressante de cette technologie dans le domaine de la physique des accélérateurs de particules. En effet, les accélérateurs conventionnels basés sur des cavités à radiofréquences sont capables de soutenir des champs électriques dont l'amplitude est limitée à environ  $10^8$  V/m [32] ; au-delà de cette limite, il se produit un phénomène de claquage et il y a apparition d'arcs électriques au niveau des structures métalliques. En raison des champs beaucoup plus forts qu'ils peuvent produire, les lasers de haute puissance pourraient ainsi permettre le développement d'accélérateurs de particules plus compacts que les accélérateurs conventionnels en fonction aujourd'hui [73]. Ces dispositifs trouveraient une multitude d'applications, allant de la production de sources compactes et cohérentes de rayons X [119, 141] jusqu'à leur utilisation dans le traitement du cancer [50], en passant par leur emploi dans des expériences d'imagerie atomique et moléculaire [145, 193].

Pour arriver à la réalisation d'un accélérateur de particules fonctionnant à partir d'un laser de haute puissance, il est nécessaire de trouver une manière efficace d'appliquer le champ électromagnétique sur une ou plusieurs particules. En raison de la très grande différence entre la masse de l'électron et celle du proton (rappelons que  $m_e/m_p \approx 1/1836$ ), les méthodes proposées pour accélérer des électrons et des ions à l'aide du laser sont en général très différentes.

Dans cette thèse, nous abordons la problématique de l'accélération d'électrons par laser. Plus spéci-

fiquement, nous nous intéressons à la modélisation d'un schéma d'accélération d'électrons basé sur l'utilisation d'impulsions laser de polarisation radiale. Cette méthode exploite une symétrie particulière des faisceaux de polarisation radiale qui favorise l'émergence d'une composante longitudinale de champ électrique dans des conditions de forte focalisation. Sous l'action du champ électrique longitudinal, un électron situé près du plan focal peut être violemment accéléré parallèlement à l'axe optique, dans la même direction que se propage l'impulsion laser.

L'objectif de ce premier chapitre est de fournir une mise en contexte et une introduction à la problématique de recherche abordée dans cette thèse. La section §1.1 dresse d'abord un bref survol des différentes techniques d'accélération d'électrons par laser. Le schéma d'accélération particulier auquel nous nous intéressons est ensuite présenté à la section §1.2. Enfin, la section §1.3 présente concrètement les objectifs et l'organisation de cet ouvrage.

## **1.1 Accélération d'électrons par laser : un survol**

L'idée d'utiliser le laser pour accélérer des électrons remonte aussi loin que le début des années 1960 [148]. Les progrès effectués dans cette direction au cours des cinquante dernières années ont démontré que le développement d'un schéma d'accélération laser efficace n'est toutefois pas une tâche si simple. En effet, il est connu depuis longtemps qu'une particule chargée ne peut être accélérée par une onde plane dans le vide [42]. Afin de maximiser le transfert d'énergie d'une impulsion laser à une particule, des schémas plus complexes doivent être employés. Dans le cadre de l'accélération d'électrons, les méthodes les plus fréquemment citées sont l'accélération par effet Cherenkov inverse, l'accélération par structure diélectrique, l'accélération par onde de sillage dans un plasma et l'accélération dans le vide.

L'accélération par effet Cherenkov inverse est basée sur le ralentissement de la vitesse de phase d'une onde électromagnétique lorsqu'elle se propage dans un gas de densité atmosphérique [46, 155]. Des électrons injectés dans le dispositif peuvent alors se propager en restant en phase sur une certaine distance avec l'impulsion laser dont la vitesse de phase a été réduite. L'accélération par effet Cherenkov inverse a été démontrée en laboratoire au cours de années 1990 [80]. Ce concept semble toutefois avoir été progressivement abandonné en raison des problèmes potentiels causés par l'ionisation à très haute puissance et de son manque d'intérêt par rapport aux schémas d'accélération alternatifs.

L'accélération par structure diélectrique procède de manière similaire à celle par effet Cherenkov inverse. Dans ce cas, on utilise une structure diélectrique périodique illuminée par un laser à incidence normale pour créer sur mesure un mode longitudinal dont la vitesse de phase est adaptée à celle des électrons injectés le long de la structure. Aussi connue sous le nom d'accélération par effet Smith-Purcell inverse, l'idée originale de cette technique remonte à la fin des années 1960 [162]. Le seuil de dommage des structures diélectriques étant beaucoup plus élevé que celui des structures métalliques, ce schéma d'accélération laisse entrevoir la possibilité de créer des gradients d'accélération significativement plus importants que ceux des accélérateurs linéaires conventionnels [27]. L'accélération par



structure diélectrique a récemment attiré beaucoup d'attention suite à sa démonstration expérimentale en 2013 par deux groupes indépendants [27, 127]. Le faible coût de production et la très petite taille des structures diélectriques utilisées laissent entrevoir l'émergence du concept d'accélérateur sur une puce (*accelerator on a chip*), et la possibilité de combiner ces dispositifs en série est prometteuse. Il y a fort à parier que les prochaines années seront le théâtre de plusieurs progrès intéressants dans cette lignée de recherche.

L'accélération d'électrons par onde de sillage dans un plasma (*plasma wakefield acceleration*) est la technique qui a récolté le plus d'attention et de succès jusqu'à maintenant. Ce schéma, proposé initialement en 1979 par Tajima et Dawson [161], consiste à exciter une onde de plasma à l'aide d'une impulsion laser de haute puissance et à tirer profit du champ électrique longitudinal du plasma pour accélérer les électrons. Les électrons injectés peuvent provenir d'une source externe ou bien du plasma lui-même. En théorie, une onde de plasma peut soutenir un champ électrique de plus de  $10^{11}$  V/m, ce qui est largement supérieur à ce qui peut être soutenu dans un accélérateur linéaire conventionnel [43]. La première réalisation expérimentale de l'accélération d'électrons par battement d'ondes dans un plasma, réalisée par Clayton *et al.* en 1993 [34], constitue la première démonstration convaincante de l'accélération d'électrons par laser. De cette première expérience jusqu'à la première moitié des années 2000, les accélérateurs plasmas sont parvenus à accélérer des électrons jusqu'à des énergies de l'ordre de 100 MeV (e.g., [51, 101, 117]). Les paquets d'électrons générés dans ces expériences présentaient des propriétés qui laissaient à désirer, notamment une distribution en énergie exponentielle très large.

Un point tournant dans la technologie de l'accélération par onde de plasma s'est toutefois produit en 2004. Motivés par la découverte en 2002 du soi-disant *bubble regime* ou *blow-out regime* par le biais de simulations *particle-in-cell* réalisées par Pukhov et Meyer-ter-Vehn [132], trois groupes sont indépendamment parvenus à produire des paquets d'électrons quasi-monoénergétiques et bien collimés à des énergies de l'ordre de 100 MeV [45, 56, 102]. Ces trois expériences d'importance capitale ont été publiées simultanément dans l'édition du 30 septembre 2004 de la revue *Nature* qui porte le titre évocateur de *Dream Beam*. Suite à ces développements, les expériences d'accélération par onde de plasma parviennent aujourd'hui à accélérer des paquets d'électrons de bonne qualité à des énergies supérieures au GeV [184]. Ceci laisse entrevoir des applications intéressantes à moyen terme pour le développement de sources de rayons X et à long terme pour le développement d'une nouvelle génération de collisionneurs [71]. Étant donné la courte longueur d'onde de l'onde de plasma, les accélérateurs plasma offrent intrinsèquement la possibilité de générer des impulsions d'électrons très brèves, d'une durée femtoseconde [93] et potentiellement attoseconde [90], mais à des énergies relativistes.

Un défi de taille dans la réalisation expérimentale d'un accélérateur plasma est l'existence d'instabilités de plasma qui en dégradent les performances [43]. Afin de remédier à ces difficultés, certains scientifiques ont cherché à développer des approches plus simples comme l'accélération dans le vide.

Dans un schéma d'accélération dans le vide, l'électron est accéléré directement par le champ électromagnétique du laser. Plusieurs approches sont basées sur l'utilisation d'un faisceau gaussien, où l'électron interagit principalement avec les composantes transverses du champ électromagnétique. Cette interaction est souvent décrite en terme de la force pondéromotrice. Celle-ci stipule que la trajectoire d'un électron, moyennée dans le temps sur les oscillations rapides du champ, le mènera vers les régions de faible intensité [78, 79]. Aux énergies relativistes, l'accélération procède par un mécanisme généralement appelé diffusion pondéromotrice relativiste [66, 67, 133]. Dans ce dernier, un électron initialement situé près du plan focal est rapidement accéléré hors de la région de haute intensité par la composante transverse du champ électrique, puis sa trajectoire est ensuite déviée dans la direction de propagation du faisceau sous l'effet du terme  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  de la force de Lorentz [175]. Ce schéma d'accélération a été démontré expérimentalement à la fin des années 1990 [98]. En injectant avec un certain angle des électrons initialement relativistes dans un faisceau gaussien focalisé, il est également possible de synchroniser leur mouvement avec un front de phase afin de maximiser leur gain en énergie [123, 183]. Dans les approches basées sur la force exercée par les composantes transverses du champ électromagnétique, les électrons sont poussés en périphérie du faisceau et quittent la région focale avec une grande vitesse transversale. Afin de limiter l'excursion dans la direction transverse et d'obtenir des paquets d'électrons mieux collimés, il a entre autres été proposé de combiner un faisceau gaussien avec un mode d'ordre supérieur afin de créer un potentiel pondéromoteur qui confine les électrons près de l'axe optique [159].

En guise d'alternative aux schémas d'accélération dans le vide basés sur les composantes transverses du champ électromagnétique, il est également possible de tirer profit de la composante longitudinale du champ électrique pour accélérer les électrons. C'est le cas du schéma d'accélération dont traite cet ouvrage et qui est décrit à la section suivante.

## 1.2 Accélération d'électrons par impulsions laser de polarisation radiale

Dans cette thèse, on s'intéresse à la modélisation d'un schéma d'accélération d'électrons dans le vide basé sur l'utilisation d'impulsions laser de polarisation radiale. Les premières traces de cette idée d'utiliser un mode laser exotique pour l'accélération d'électrons dans le vide remontent aux années 1990 avec les articles de Bochove *et al.* [22], Esarey *et al.* [44] et Hellwarth et Nouchi [70]. L'utilisation du mode  $TM_{01}$  pour l'accélération d'électrons fut ensuite formulée plus précisément par Charles Varin et Michel Piché en 2002 [177].

Le schéma d'accélération en question est de prime abord très simple. L'idée de base est d'utiliser un faisceau laser pulsé de haute puissance de type  $TM_{01}$ , où  $TM$  signifie transverse magnétique et l'indice 01 indique qu'il s'agit du mode  $TM$  fondamental. Tel qu'illustré à la figure 1.1, ce mode laser présente un patron de polarisation radiale. En raison de la symétrie angulaire de la composante radiale de son champ électrique, le faisceau  $TM_{01}$  a la particularité de présenter, sous forte focalisation,

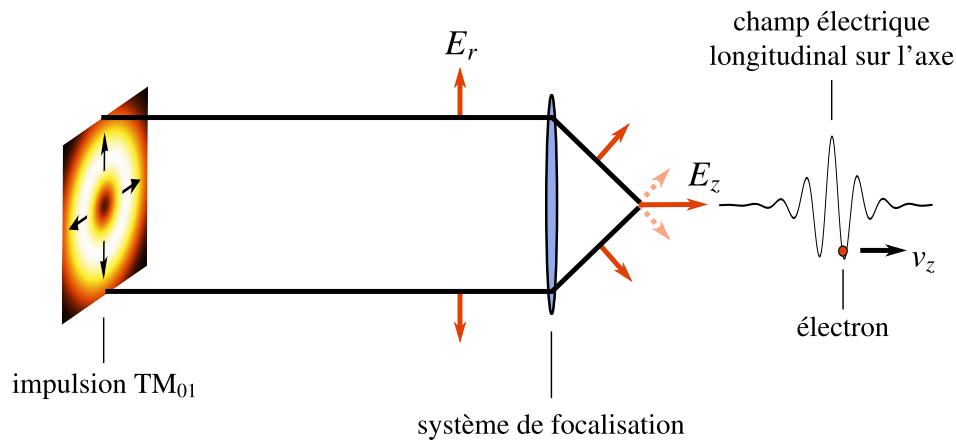


Figure 1.1 – Représentation schématique de l'accélération d'un électron par une impulsion  $TM_{01}$  ultrabrève. Lors de la focalisation d'une impulsion  $TM_{01}$ , une forte composante longitudinale de champ électrique ( $E_z$ ) est générée près du point focal par l'interférence constructive du champ électrique radial ( $E_r$ ). Si son amplitude est suffisamment élevée, le champ électrique longitudinal peut accélérer l'électron rapidement jusqu'à une vitesse comparable à celle de la lumière. L'électron peut ainsi demeurer en phase sur une certaine distance avec le même demi-cycle de champ et gagner une énergie considérable.

une importante composante de champ électrique orientée selon l'axe optique, c'est-à-dire selon la direction de propagation du faisceau. Sous l'influence de ce champ longitudinal, un électron peut être violemment accéléré le long de l'axe optique et subir, lorsque son mouvement est correctement synchronisé avec l'oscillation du champ électrique, un gain en énergie considérable. On parle alors d'un mécanisme d'accélération sous-cycle : à l'image d'un surfeur qui gagne de la vitesse en étant emporté par une vague, l'électron est accéléré en restant en phase avec un même demi-cycle du champ électrique longitudinal sur une certaine distance. La figure 1.1 illustre de manière schématique le fonctionnement du schéma d'accélération.

Les travaux publiés en 2002 par Varin et Piché ont initié chez plusieurs groupes de recherche un effort de modélisation de l'accélération d'électrons à l'aide du mode laser  $TM_{01}$  (voir par exemple [21, 35, 47, 48, 75, 97, 138, 139, 150, 174, 178, 179, 186, 187, 188]). Ces travaux ont mis en évidence plusieurs propriétés intéressantes du schéma d'accélération. Outre le fait que cette méthode est caractérisée par de faibles pertes radiatives en raison d'une accélération linéaire [179] et qu'elle n'impose pas de contraintes sur l'intensité laser [186], un des résultats les plus étonnants mis de l'avant par les travaux de modélisation est la possibilité de générer des impulsions d'électrons relativistes bien collimées d'une durée attoseconde à l'aide d'impulsions  $TM_{01}$  de haute puissance [75, 178]. En effet, par la nature même du mécanisme d'accélération sous-cycle, les électrons peuvent être comprimés à l'intérieur d'un même demi-cycle de champ électrique et ainsi former une impulsion très courte.

Bien que les travaux théoriques précédents ont pu jusqu'à maintenant nous en apprendre beaucoup sur les propriétés de l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$ , il n'en demeure pas moins qu'ils présentent certaines limites. En effet, la grande majorité des travaux de modélisation sur l'accéléra-

tion par impulsions  $TM_{01}$  ont basé leurs calculs sur l'utilisation de l'approximation paraxiale et/ou de l'approximation de l'enveloppe lente. Ces deux approximations, qui interviennent au niveau de la description mathématique de l'impulsion  $TM_{01}$ , consistent respectivement à considérer que l'impulsion n'est pas trop fortement focalisée et que sa durée est longue en comparaison avec celle d'un cycle optique. Bien qu'ils facilitent l'obtention de solutions aux équations de Maxwell, ces deux outils sont inadéquats pour décrire correctement le champ électromagnétique d'une impulsion dans des conditions de durée très courte et de forte focalisation. Ils limitent ainsi le domaine d'applicabilité des travaux qui en font l'utilisation.

Mentionnons également qu'en marge des travaux de modélisation mentionnés précédemment, des efforts expérimentaux importants déployés dans les dernières années ont récemment mené à la première réalisation de l'accélération d'électrons par impulsions de polarisation radiale en laboratoire [126]. Le défi principal associé à la réalisation expérimentale de ce schéma d'accélération est la production d'impulsions de polarisation radiale de très haute puissance. Dans l'expérience réalisée et publiée en 2012 par les groupes des Profs. Jean-Claude Kieffer et François Légaré du laboratoire ALLS de l'INRS (Varenes), l'utilisation d'un convertisseur de polarisation composé d'une mosaïque circulaire de lames demi-onde a permis la génération d'impulsions  $TM_{01}$  d'une durée de 15 fs à  $1.8 \mu\text{m}$  et d'une puissance de l'ordre de 50 GW. Focalisées très fortement dans un gaz de faible densité par un miroir parabolique de grande ouverture numérique, le champ électrique longitudinal de ces impulsions laser a permis d'accélérer des électrons jusqu'à une énergie de l'ordre de 25 keV. Bien que la puissance n'ait pas été suffisante pour atteindre des énergies relativistes, cette expérience pionnière a démontré que l'accélération d'électrons par impulsions laser de polarisation radiale est bel et bien à la portée de la technologie actuelle. Des expériences similaires sont déjà prévues dans d'autres groupes de recherche [29], ce qui laisse entrevoir un avenir excitant pour cette technique d'accélération.

### 1.3 À propos de cette thèse

La découverte du laser à synchronisation modale au cours des années 1960 est généralement considérée comme la genèse de l'optique ultrabrève [25]. Dans un laser à synchronisation modale, un très grand nombre de modes longitudinaux oscillent simultanément en phase, résultant en un champ nul la majorité du temps à l'exception d'intervalles de temps extrêmement courts pendant lesquels l'énergie électromagnétique est concentrée. Une révolution majeure dans le domaine des lasers à impulsions ultrabréves a été marquée par la découverte de l'autosynchronisation modale dans les laser titane-saphir (Ti:saphir) en 1991 [153]. Le laser Ti:saphir a la particularité de présenter un milieu de gain à bande amplificatrice très large, permettant en principe de soutenir des impulsions aussi courtes que 3 fs. Les systèmes laser Ti:saphir de pointe permettent aujourd'hui de produire des impulsions laser stabilisées en phase dont la durée est de l'ordre de 5 fs, soit environ deux cycles optiques à 800 nm, et dont l'énergie atteint le millijoule [3, 33, 110].

Parallèlement aux efforts visant à produire des impulsions dont l'extension temporelle est la plus pe-

tite possible, plusieurs chercheurs se sont intéressés de manière analogue à la réduction maximale de l'extension spatiale d'un faisceau laser au point focal. À l'aide d'optiques de focalisation à grande ouverture numérique de très haute qualité (par exemple un miroir parabolique), il est aujourd'hui possible de focaliser un faisceau laser sur une tache focale dont la dimension est inférieure à la longueur d'onde. À titre d'exemple, Dorn *et al.* ont réussi en 2003 à focaliser un faisceau de polarisation radiale sur une tache focale dont la dimension est de  $0.45\lambda$  [40]. Quelques années plus tard, Stadler *et al.* sont similairement parvenus à générer une tache focale encore plus petite, soit  $0.41\lambda$  [156]. Ces résultats s'approchent énormément de la valeur de  $0.36\lambda$ , établie comme étant la limite de focalisation ultime en lumière monochromatique [59, 89].

Lorsque la durée de l'impulsion s'approche de la limite d'un cycle optique et que sa taille dans le plan focal est de l'ordre de la longueur d'onde, une description rigoureuse du champ électromagnétique est indispensable. Dans ces conditions extrêmes d'impulsions ultrabrèves et fortement focalisées, l'approximation paraxiale et l'approximation de l'enveloppe lente perdent leur validité et échouent à décrire correctement le comportement spatiotemporel du champ électromagnétique. En d'autres mots, les impulsions dites ultrabrèves et non paraxiales doivent être modélisées comme étant des solutions exactes aux équations de Maxwell.

L'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  est basée sur la force accélératrice générée directement par le champ électrique longitudinal. Par conséquent, ce schéma d'accélération est intimement lié à la production d'impulsions laser ultrabrèves et fortement focalisées. À titre d'exemple, la démonstration expérimentale de l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  réalisée à l'INRS a été rendue possible grâce à des impulsions laser qui vont au-delà des limites d'applicabilité généralement établies pour l'approximation paraxiale et l'approximation de l'enveloppe lente [126]. La production de ces impulsions étant maintenant accessible dans un nombre croissant de laboratoires, il est important de s'intéresser à leur effet dans le cadre de l'accélération de particules.

Dans la littérature, on retrouve peu d'articles qui s'intéressent à l'étude de l'accélération d'électrons par des impulsions laser ultrabrèves et non paraxiales de polarisation radiale. En 2005, Varin *et al.* [179] ont étudié la dynamique lorsque des impulsions ultrabrèves mais paraxiales sont utilisées. Salamin [139] ainsi que Dai *et al.* [35] ont ensuite considéré des faisceaux  $TM_{01}$  non paraxiaux en régime continu, c'est-à-dire des faisceaux monochromatiques de durée infinie. Bochkarev *et al.* [21] ont considéré des impulsions  $TM_{01}$  non paraxiales, mais dont la durée est assez longue pour satisfaire à l'approximation de l'enveloppe lente. Au moment de débiter les travaux de doctorat présentés dans cette thèse, seulement deux publications avaient considéré des impulsions à la fois ultrabrèves et non paraxiales [75, 92]. Les travaux de Karmakar et Pukhov [75] sont toutefois limités à l'étude d'un seul ensemble de paramètres, tandis que ceux de Liu *et al.* [92] sont basés sur une théorie dont la validité devient discutable dans la limite des impulsions très courtes. Bien que ces contributions aient abordé une partie du problème, une étude exhaustive de la dynamique dans le régime ultrabref et non paraxial demeure manquante.

L'objectif principal de cette thèse de doctorat est d'investiguer l'accélération d'électrons par impulsions laser de polarisation radiale en régime d'impulsions ultrabrèves et fortement focalisées. Le but de cette recherche est évidemment de faire ressortir les caractéristiques intéressantes de la dynamique dans ce régime de conditions extrêmes. Afin de rendre cette étude possible, il est nécessaire de trouver une méthode simple et efficace permettant de modéliser de manière exacte les impulsions laser de polarisation radiale. Nous verrons que la solution à ce problème est apportée par une méthode originale développée par Alexandre April durant ses études doctorales sous la direction du Prof. Michel Piché. En ce sens, les travaux présentés dans cette thèse se veulent l'unification et la continuité des travaux de doctorat de Charles Varin et d'Alexandre April.

Cette thèse est organisée de la manière suivante :

**Chapitre 2 – Notions préliminaires, partie I : théorie.** Ce chapitre présente les notions théoriques nécessaires à la modélisation de l'accélération d'électrons par laser. On y trouve d'abord une présentation des ingrédients d'électrodynamique classique relativiste impliqués dans l'interaction de particules chargées avec un champ électromagnétique. Ensuite, les différents outils qui permettent de modéliser une impulsion laser de mode  $TM_{01}$  sont présentés. Une première solution est d'abord obtenue à l'aide de l'approximation paraxiale et de l'approximation de l'enveloppe lente. Dans un deuxième temps, une méthode systématique permettant d'obtenir une solution exacte sous forme fermée pour l'impulsion  $TM_{01}$  est introduite. Finalement, un bref aperçu des différentes propriétés de l'accélération directe d'électrons par champ longitudinal est offert.

**Chapitre 3 – Notions préliminaires, partie II : simulations numériques.** Ce chapitre contient une présentation des différentes techniques de simulation numérique qui ont été utilisées lors de ces travaux de recherche. Une première partie est consacrée à la description des simulations de type particule test, qui sont utilisées dans les chapitres 4 à 7. La deuxième et majeure partie du chapitre est ensuite consacrée à la description des simulations de type particle-in-cell (PIC), qui sont utilisées dans les chapitres 6 et 7.

**Chapitre 4 – Accélération d'un électron sur l'axe optique.** Ce chapitre est articulé autour d'une première contribution à la littérature, soit un article publié en 2012 dans la revue *Optics Letters*. Dans cette publication, nous présentons une analyse exhaustive de la dynamique d'accélération dans des conditions de forte focalisation et d'impulsions ultrabrèves pour le cas d'un électron initialement au repos sur l'axe optique, cas limite où le problème se réduit à une dimension spatiale. Les résultats obtenus dans ce chapitre démontrent deux caractéristiques intéressantes de l'accélération en régime d'impulsions ultrabrèves et non paraxiales, soit la possibilité de réduire significativement le seuil d'accélération et l'amélioration de l'efficacité d'extraction d'énergie à haute puissance.

**Chapitre 5 – Validité de l'approximation paraxiale.** Ce chapitre contient la reproduction d'une seconde contribution à la littérature, soit un article publié en 2013 dans la revue *Optics Letters*. Dans cette contribution, nous n'étudions pas à proprement parler l'accélération par des impulsions ultrabrèves et fortement focalisées ; nous nous concentrons plutôt sur des conditions de focalisation modé-

rées, correspondant à un régime habituellement considéré comme paraxial. En comparant les résultats obtenus à l'aide de la solution exacte du faisceau  $TM_{01}$  et sa solution paraxiale correspondante lors de l'accélération d'un nuage d'électrons en deux dimensions, nous montrons que contre toute attente, l'approximation paraxiale échoue à capturer correctement la dynamique. Nous démontrons que cet échec de l'approximation paraxiale est dû à la présence d'une symétrie artificielle dans l'expression du champ électromagnétique. La leçon à tirer de ce chapitre est que pour modéliser correctement l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$ , des solutions aussi précises que possible aux équations de Maxwell doivent être utilisées.

**Chapitre 6 – Génération d'impulsions d'électrons ultrabrèves, partie I : preuve de concept.** Ce chapitre est articulé autour d'une troisième contribution à la littérature, soit un article publié en 2013 dans la revue *Physical Review Letters*. Nous y étudions l'accélération d'électrons résultant de l'interaction d'une impulsion  $TM_{01}$  ultrabrève et fortement focalisée avec un gaz de faible densité. Pour des paramètres laser réalistes dans le cadre de la technologie laser millijoule actuelle, nous démontrons la possibilité de produire des impulsions d'électrons quasi-monoénergétiques avec une énergie de 240 keV et une durée initiale de l'ordre de la femtoseconde. Ces résultats sont appuyés par la réalisation de simulations de type PIC en trois dimensions qui prennent en compte la dynamique d'ionisation atomique. La production d'impulsions d'électrons dans la fenêtre énergétique de 100 à 300 keV revêt un intérêt particulier pour les expériences d'imagerie atomique et moléculaire par diffraction électronique ultrarapide. Considérant la durée sans précédent de nos impulsions d'électrons à ces énergies, nos résultats ouvrent une avenue intéressante vers l'amélioration de la résolution temporelle de ces expériences.

**Chapitre 7 – Génération d'impulsions d'électrons ultrabrèves, partie II : accordabilité.** Ce chapitre constitue une extension logique des résultats présentés au chapitre précédent. Il est constitué d'une quatrième contribution à la littérature, soit un article publié en 2015 dans la revue *Journal of Physics B*. Dans cet article, nous étudions l'effet des différents paramètres laser, soit la puissance, la phase, la focalisation et la durée d'impulsion, sur la production d'impulsions d'électrons ultrabrèves. Cette étude paramétrique nous permet de mettre en évidence la versatilité appréciable du schéma d'accélération proposé. Nous analysons aussi les propriétés des impulsions d'électrons produites dans une perspective d'application future dans des expériences de diffraction électronique ultrarapide.

**Chapitre 8 – Conclusion.** Ce chapitre résume les contributions principales issues de cette thèse et offre quelques pistes de recherche pour la suite de ces travaux.





## Chapitre 2

# Notions préliminaires, partie I : théorie

Bien que l'interaction d'une particule chargée avec un champ électromagnétique soit décrite par des lois assez simples, il s'agit d'un phénomène d'une très grande richesse lorsqu'on le soumet aux différents types de solutions qu'admettent les équations de Maxwell. Ce premier chapitre est consacré à la présentation des outils théoriques qui sont utilisés lors de la modélisation de l'accélération d'électrons par laser. On y présente la théorie de l'interaction laser-électron ainsi que certaines techniques de résolution des équations de Maxwell pour la description d'impulsions laser.

Ce chapitre est structuré de la manière suivante. Les notions d'électrodynamique classique nécessaires sont d'abord introduites à la section §2.1. Quelques résultats généraux concernant l'accélération d'électrons dans le vide y sont également présentés. Le formalisme permettant de décrire mathématiquement des impulsions laser de type  $TM_{01}$  est ensuite introduit. En guise de mise en contexte, on présente dans un premier temps à la section §2.2 une solution pour l'impulsion  $TM_{01}$  basée sur l'approximation paraxiale et de l'approximation de l'enveloppe lente. Une solution exacte pour l'impulsion  $TM_{01}$  est ensuite obtenue à la section §2.3. Finalement, la section §2.4 décrit brièvement le mécanisme permettant d'accélérer des électrons à l'aide d'impulsions laser de polarisation radiale.

### 2.1 Électrodynamique classique relativiste

La physique des accélérateurs de particules est décrite par les lois et principes de l'électrodynamique classique relativiste. Cette section en présente les ingrédients de base, soit les équations de Maxwell et la force de Lorentz, ainsi que quelques résultats généraux concernant l'accélération de particules.

#### 2.1.1 Équations de Maxwell

La variation spatiotemporelle d'un champ électromagnétique dans un milieu donné est décrite par les équations de Maxwell. Sous leur forme différentielle et microscopique pour le vide, ces équations

s'expriment de la manière suivante [72] :

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.4)$$

Ici  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  et  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  représentent respectivement les champs électrique et magnétique, et  $\rho(\mathbf{r}, t)$  et  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$  sont les densités de charge et de courant. Les constantes  $\epsilon_0$  et  $\mu_0$  correspondent à la permittivité et la perméabilité du vide, tandis que  $c = (\mu_0 \epsilon_0)^{-1/2}$  est la vitesse de la lumière dans le vide.

Lors de la modélisation d'impulsions laser, on suppose généralement que le champ électromagnétique se propage dans le vide. Dans ce cas particulier, les termes de sources sont nuls ( $\rho = 0$ ,  $\mathbf{J} = \mathbf{0}$ ). Il est alors possible de démontrer à l'aide des équations (2.1)–(2.4) que les champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  satisfont l'équation d'onde homogène,

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \mathbf{0}, \quad \nabla^2 \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = \mathbf{0}. \quad (2.5)$$

Chaque composante cartésienne des champs électrique et magnétique satisfait ainsi l'équation d'onde scalaire.

Le champ électromagnétique peut également être analysé dans le domaine spectral en prenant la transformée de Fourier temporelle de l'équation (2.5). En dénotant  $\tilde{\mathbf{E}}$  et  $\tilde{\mathbf{B}}$  les transformées de Fourier temporelles des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$ , on obtient alors l'équation de Helmholtz,

$$\nabla^2 \tilde{\mathbf{E}} + k^2 \tilde{\mathbf{E}} = \mathbf{0}, \quad \nabla^2 \tilde{\mathbf{B}} + k^2 \tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{0}, \quad (2.6)$$

où  $k = \omega/c$  relie le vecteur d'onde  $k$  à la fréquence angulaire  $\omega$  de la composante spectrale.

### 2.1.2 Force de Lorentz

Soit une particule de masse  $m$  et de charge  $q$  plongée dans un champ électromagnétique décrit par les vecteurs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$ . Considérons sans perte de généralité qu'il s'agit d'un électron, tel que  $q = -e$  et  $m = m_e$ . Selon les lois de l'électrodynamique classique relativiste, la trajectoire de l'électron est décrite par les équations de Newton-Lorentz [72] :

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}, \quad (2.7)$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \mathbf{F}_L, \quad (2.8)$$

où  $\mathbf{r}$  représente le vecteur position de l'électron,  $\mathbf{v}$  son vecteur vitesse,  $\mathbf{p} = \gamma m_e \mathbf{v}$  son vecteur impulsion avec  $\gamma = (1 - |\mathbf{v}|^2/c^2)^{-1/2}$ . Sous l'action de la force de Lorentz, notée  $\mathbf{F}_L$ , l'énergie de l'électron, définie

par  $W = \gamma m_e c^2$ , est soumise à la variation suivante :

$$\frac{dW}{dt} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \mathbf{F}_L = -e(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}) . \quad (2.9)$$

L'absence du champ magnétique  $\mathbf{B}$  dans cette expression provient du fait que la force qu'il engendre est orientée perpendiculairement à la vitesse  $\mathbf{v}$ , opérant ainsi un travail nul sur la particule. En combinant les équations (2.8) et (2.9), il est possible d'obtenir une équation différentielle pour la vitesse, soit :

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{e}{\gamma m_e} \left[ \mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B} - \frac{\mathbf{v}}{c^2} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}) \right] . \quad (2.10)$$

La procédure générale utilisée pour modéliser l'accélération d'un électron par une impulsion laser est ainsi la suivante. Une description de l'impulsion laser est obtenue en solutionnant les équations de Maxwell pour les champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$ . Ces derniers sont ensuite insérés dans les équations de Newton-Lorentz, qui sont intégrées afin d'obtenir la trajectoire suivie par un électron sous l'influence du champ électromagnétique.

### 2.1.3 Émission de radiation et validité du cadre théorique

Le lecteur aura probablement remarqué que la procédure décrite au paragraphe précédent constitue une description approximative de la réalité. En effet, il est bien connu qu'une charge accélérée perd une certaine quantité de son énergie sous forme de radiation. L'émission de cette radiation entraîne un amortissement instantané de la particule chargée en mouvement. Il est toutefois possible de montrer que cet effet est négligeable aux intensités laser qui nous intéressent.

La puissance instantanée totale rayonnée par un électron en mouvement est donnée par la généralisation relativiste de la formule de Larmor [72],

$$P_{\text{rayon.}} = \frac{\gamma^2 \tau_e}{m_e} \left[ \left( \frac{d\mathbf{p}}{dt} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left( \frac{dW}{dt} \right)^2 \right] , \quad (2.11)$$

où la constante  $\tau_e$  vaut

$$\tau_e \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{3m_e c^3} \approx 6.26 \times 10^{-24} \text{ s} . \quad (2.12)$$

Pour qu'il y ait conservation de l'énergie, l'équation (2.8) doit être modifiée en considérant l'amortissement causé par l'émission de radiation. Cela se traduit par l'ajout d'une force de réaction radiative  $\mathbf{F}_{\text{rad}}$  :

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}_L + \mathbf{F}_{\text{rad}} . \quad (2.13)$$

L'expression la plus couramment utilisée<sup>1</sup> pour modéliser la force  $\mathbf{F}_{\text{rad}}$  est l'équation de Landau-Lifshitz [85],

$$\mathbf{F}_{\text{rad}} = \gamma e \tau_e \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \mathbf{E} + \mathbf{v} \times \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) \mathbf{B} \right] + \frac{e^2 \tau_e}{m_e c} \left[ (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} + \frac{1}{c^2} \mathbf{E} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}) \right] - \frac{\gamma^2 e^2 \tau_e}{m_e c^2} \mathbf{v} \left[ (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})^2 - \frac{1}{c^2} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v})^2 \right]. \quad (2.14)$$

Pour le cas particulier de l'interaction d'un électron initialement au repos avec une onde plane, il est possible d'obtenir une solution analytique à l'équation (2.13) dans laquelle  $\mathbf{F}_{\text{rad}}$  est donnée par l'équation (2.14) [61]. À l'aide de cette solution, on peut montrer que les effets de la force de réaction radiative  $\mathbf{F}_{\text{rad}}$  sont négligeables lorsque [28, 61, 82]

$$\left( \frac{e E_0}{m_e c \omega} \right)^2 \ll \frac{1}{\omega \tau_e}, \quad (2.15)$$

où  $E_0$  est l'amplitude du champ électrique de l'onde plane et  $\omega$  sa fréquence. En supposant une onde plane de longueur d'onde  $\lambda = 800$  nm ( $\omega \approx 2.36 \times 10^{15}$  rad/s), on obtient la condition  $E_0 \ll 3.3 \times 10^{16}$  V/m sur l'amplitude du champ électrique, ce qui correspond à la contrainte  $I_0 \ll 1.4 \times 10^{26}$  W/cm<sup>2</sup> en terme d'intensité<sup>2</sup>. Dans cet ouvrage, nous nous limiterons, dans les cas les plus extrêmes, à des intensités maximales de l'ordre de  $10^{23}$ – $10^{24}$  W/cm<sup>2</sup>. L'effet de la force de réaction radiative peut ainsi à toutes fins pratiques être négligé.

Malgré tout, l'émission de radiation peut devenir une contrainte pour le fonctionnement de certains accélérateurs de particules. Les pertes radiatives peuvent en effet limiter le maximum d'énergie normalement accessible. Dans le cas d'un schéma d'accélération linéaire comme celui examiné dans cette thèse, on peut toutefois démontrer, par un argument exposé à la section §14.2 de Jackson [72], que les pertes d'énergie par rayonnement sont minimales. Pour un électron accéléré dans la direction  $z$  par un champ électrique  $E_z$  d'amplitude  $E_0$  ( $\mathbf{B} = \mathbf{0}$  pour une accélération linéaire), la puissance rayonnée vaut, d'après l'équation (2.11) :

$$P_{\text{rayon.}} = \frac{\gamma^2 \tau_e}{m_e} \left[ \left( \frac{dp_z}{dt} \right)^2 - \frac{v_z^2}{c^2} \left( \frac{dp_z}{dt} \right)^2 \right] = \frac{\tau_e}{m_e} \left( \frac{dp}{dt} \right)^2 = \frac{\tau_e}{m_e v_z} \left| \frac{dW}{dz} \right| \left| \frac{dW}{dt} \right|, \quad (2.16)$$

où on a utilisé le fait que  $dp/dt = dW/dz = v_z^{-1} dW/dt$ . Le ratio de la puissance rayonnée sur la puissance fournie par le champ électromagnétique ( $P_{\text{fournie}} = dW/dt$ ) vaut alors, pour un électron

1. En électrodynamique classique, la force d'amortissement causée par l'émission de radiation par une charge ponctuelle est donnée par l'équation de Lorentz-Abraham-Dirac [72],

$$\mathbf{F}_{\text{rad}} = \tau_e \left\{ \frac{d^2 \mathbf{p}}{dt'^2} - \frac{\mathbf{p}}{m_e^2 c^2} \left[ \left( \frac{d\mathbf{p}}{dt'} \right)^2 - \frac{1}{c^2} \left( \frac{dW}{dt'} \right)^2 \right] \right\},$$

où  $\gamma dt' = dt$ . Cette expression pour  $\mathbf{F}_{\text{rad}}$  occasionne toutefois certains paradoxes, tels que l'existence de solutions auto-accelérées et une violation du principe de causalité sur un temps de l'ordre de  $\tau_e$  [135]. L'équation de Landau-Lifshitz correspond au premier ordre du développement perturbatif de l'équation de Lorentz-Abraham-Dirac et est exempte de comportements non physiques [154].

2. Pour une onde plane, la relation entre l'intensité et l'amplitude du champ électrique est  $I_0 = E_0^2/2\eta_0$ , où  $\eta_0 = (\mu_0/\epsilon_0)^{1/2}$  est l'impédance du vide.

relativiste ( $v_z \approx c$ ) :

$$\left| \frac{P_{\text{rayon.}}}{P_{\text{fournie}}} \right| = \frac{\tau_e}{m_e v_z} \left| \frac{dW}{dz} \right| = \frac{e\tau_e E_0}{m_e c} . \quad (2.17)$$

Cette quantité, qui doit toujours être inférieure à un, possède une amplitude négligeable en autant que  $E_0 \ll 2.7 \times 10^{20}$  V/m ( $I_0 \ll 10^{34}$  W/cm<sup>2</sup>)<sup>3</sup>. Une configuration d'accélération linéaire est donc peu sensible à la perte d'énergie par rayonnement.

À titre comparatif, la situation est considérablement différente dans les accélérateurs circulaires, comme les cyclotrons et les synchrotrons. Dans une telle configuration, l'orientation de l'impulsion  $\mathbf{p}$  change rapidement sur long de la trajectoire de la particule, mais l'augmentation d'énergie sur une seule révolution est généralement faible. On a alors :

$$\left| \frac{d\mathbf{p}}{dt} \right| \approx \frac{v_\phi}{r_{\text{orb}}} |\mathbf{p}| \gg \frac{1}{c} \frac{dW}{dt} , \quad (2.18)$$

où  $r_{\text{orb}}$  est le rayon de l'orbite et  $v_\phi$  la vitesse tangentielle de l'électron. En insérant ce résultat dans l'équation (2.11), on obtient

$$P_{\text{rayon.}} \approx \frac{\tau_e}{m_e} \frac{\gamma^2 v_\phi^2}{r_{\text{orb}}^2} |\mathbf{p}|^2 . \quad (2.19)$$

En effectuant l'intégrale de cette quantité sur une orbite circulaire, on obtient l'énergie  $\delta W$  perdue par rayonnement à chaque tour :

$$\delta W = \frac{2\pi r_{\text{orb}}}{v_\phi} P_{\text{rayon.}} = \frac{e^2}{3\epsilon_0 r_{\text{orb}}} \frac{v_\phi^3 \gamma^4}{c^3} . \quad (2.20)$$

Pour un électron relativiste ( $v_\phi \approx c$ ), on a :

$$\delta W [\text{MeV}] \approx 8.85 \times 10^{-2} \frac{(W [\text{GeV}])^4}{r_{\text{orb}} [\text{m}]} . \quad (2.21)$$

La présence de l'énergie à la puissance quatre dans le côté droit de cette dernière équation fait en sorte que pour les accélérateurs fonctionnant à très haute énergie, la perte d'énergie par rayonnement devient une préoccupation importante. Par exemple, à l'ancienne infrastructure du LEP (*Large Electron-Positron Collider*) à Genève, des électrons ont pu être accélérés jusqu'à une énergie de 100 GeV sur une orbite circulaire de 4.3 km de rayon<sup>4</sup>. À ces énergies, les pertes radiatives sont énormes : elles s'élèvent à environ 2 GeV par tour. Bien qu'il soit possible de diminuer les pertes en augmentant le rayon des accélérateurs, il est évident que des contraintes de niveau économique et géographique entrent rapidement en jeu.

3. Il est pertinent de noter que cette valeur correspond environ à 200 fois le champ critique de Schwinger en électrodynamique quantique, soit  $E_{\text{cr}} = m_e^2 c^3 / e\hbar \approx 1.3 \times 10^{18}$  V/m ( $I_{\text{cr}} \approx 2.2 \times 10^{29}$  W/cm<sup>2</sup>), qui représente le champ nécessaire pour produire une paire électron-positron à partir du vide quantique [65]. À une telle intensité, l'interaction lumière-matière n'est plus adéquatement décrite par l'électrodynamique classique étant donné l'importance des effets quantiques.

4. Données tirées du site web officiel du CERN :

<http://home.web.cern.ch/about/accelerators/large-electron-positron-collider>.

En somme, pour un électron initialement au repos, l'effet d'amortissement instantané causé par l'émission de radiation peut être négligé pour des intensités laser de l'ordre de  $10^{24}$  W/cm<sup>2</sup> ou moins. Par ailleurs, dans le cas d'un schéma d'accélération linéaire tel que celui examiné dans cette thèse, les pertes par rayonnement sont négligeables en comparaison avec la puissance fournie par le champ électromagnétique.

#### 2.1.4 Le théorème de Lawson-Woodward

Avant d'aller plus loin dans la modélisation de l'accélération d'électrons par laser, il convient de présenter un théorème fréquemment cité dans la littérature, soit le théorème (ou principe) de Lawson-Woodward [44]. Ce dernier stipule que sous certaines conditions générales, une particule relativiste ne peut être accélérée par un champ électromagnétique. L'application correcte du théorème de Lawson-Woodward ayant déjà été matière à débat dans la communauté scientifique [169, 182], nous en effectuons ici la présentation et en esquissons la preuve. Différentes preuves existent (voir [44] et [122] par exemple) ; celle qui suit est tirée de [44].

**Théorème de Lawson-Woodward.** *Soit un électron se déplaçant à vitesse  $v$  dans un champ électromagnétique. Si les conditions suivantes sont respectées :*

1. *le champ électromagnétique se propage dans le vide en absence de tout obstacle*
2. *l'électron est ultra-relativiste, c'est-à-dire  $v \approx c$ , sur toute sa trajectoire ;*
3. *il n'y a aucun champ statique (électrique ou magnétique) ;*
4. *la région d'interaction entre l'électron et le champ électromagnétique est infinie ;*
5. *toute force non linéaire (force  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ , force de réaction radiative) peut être négligée ;*

*alors le gain en énergie de l'électron intégré sur toute sa trajectoire est nul.*

*Preuve* (Esarey *et al.*, 1995 [44]). On considère sans perte de généralité que l'électron se déplace à vitesse relativiste le long de l'axe  $z$ , soit l'axe défini par  $x = y = 0$ . Par conséquent, l'accélération est due à la composante  $E_z$  du champ électrique :

$$\Delta W = - \int_{-\infty}^{\infty} e \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} = -e \int_{-\infty}^{\infty} E_z dz . \quad (2.22)$$

Sachant que toute solution à l'équation de Helmholtz (2.6) peut s'écrire sous la forme d'une somme continue d'ondes planes transverses [72], la composante  $E_z$  du champ électrique peut être exprimée sous la forme suivante, pour un signal de fréquence  $\omega$  :

$$E_z = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \widehat{E}_z(k_x, k_y) e^{i(\omega t - k_x x - k_y y - k_z z)} , \quad (2.23)$$

où  $\widehat{E}_z(k_x, k_y)$  est la transformée de Fourier spatiale de la composante  $E_z$  et  $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \omega^2/c^2$ . Puisque les composantes  $E_x$  et  $E_y$  du champ électrique peuvent elles aussi être exprimées sous une

forme similaire à (2.23), l'équation de la divergence  $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$  nous permet de relier les trois amplitudes de Fourier  $\widehat{E}_x$ ,  $\widehat{E}_y$  et  $\widehat{E}_z$  selon

$$k_z \widehat{E}_z = -k_x \widehat{E}_x - k_y \widehat{E}_y . \quad (2.24)$$

On peut supposer sans perte de généralité que  $\widehat{E}_y = 0$ . Pour un électron se déplaçant à la vitesse  $v_z \approx c$  sur l'axe  $z$ , on a  $t = z/c$  et le gain en énergie s'exprime alors sous la forme

$$\begin{aligned} \Delta W &= \frac{e}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \frac{k_x}{k_z} \widehat{E}_x(k_x, k_y) e^{i(\omega z/c - k_z z)} , \\ &= \frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \frac{k_x}{k_z} \widehat{E}_x(k_x, k_y) \delta(k_z - \omega/c) , \end{aligned} \quad (2.25)$$

où la transformée de Fourier de la fonction delta a été utilisée pour obtenir la seconde égalité. En effectuant le changement de variable  $k_x = k_{\perp} \cos \phi$ ,  $k_y = k_{\perp} \sin \phi$  et en utilisant la propriété  $\delta[g(x)] = \sum_j \delta(x - x_j)/|g'(x_j)|$  où  $g(x_j) = 0$  pour obtenir  $\delta(k_z - \omega/c) = (k_z/k_{\perp})\delta(k_{\perp})$ , il devient évident que le gain en énergie de l'électron intégré sur toute sa trajectoire sera nul :

$$\Delta W = \frac{e}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} dk_{\perp} k_{\perp} \cos \phi \widehat{E}_x(k_{\perp} \cos \phi, k_{\perp} \sin \phi) \delta(k_{\perp}) = 0 , \quad (2.26)$$

où il a été supposé que le champ respecte  $k_x \widehat{E}_x \rightarrow 0$  quand  $k_x \rightarrow 0$ . Il est facile de se convaincre que le résultat (2.26) demeure valide pour tout champ électrique constitué d'une somme de composantes spectrales de différentes fréquences.  $\square$

Ainsi, afin d'arriver à accélérer un électron à l'aide d'une impulsion laser, il faut violer au moins une des cinq conditions du théorème de Lawson-Woodward. Il convient en premier lieu d'examiner la configuration la plus simple qu'il est possible d'imaginer, soit l'accélération d'un électron par une onde plane pulsée.

### 2.1.5 Le cas particulier de l'onde plane de durée finie

La solution la mieux connue et la plus simple aux équations de Maxwell est l'onde plane transverse. Il s'agit également d'un des uniques cas pour lesquels les équations de Newton-Lorentz peuvent être solutionnées analytiquement (voir par exemple [66, 130]). On présente ici une partie de cette solution analytique.

Afin de décrire le champ électromagnétique d'une onde plane, il est utile d'avoir recours à un potentiel vecteur magnétique  $\mathbf{A}$ . Dans la jauge de Coulomb et en absence de charges et de sources de courant, le potentiel vecteur magnétique détermine entièrement les champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  [72] :

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad , \quad \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} . \quad (2.27)$$

Il satisfait également à l'équation d'onde homogène :

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = \mathbf{0} . \quad (2.28)$$

La solution générale de cette équation pour un potentiel vecteur se propageant selon l'axe  $z$  positif et produisant un champ électrique linéairement polarisé selon l'axe  $x$  est

$$\mathbf{A} = \hat{\mathbf{e}}_x A_x(t - z/c) . \quad (2.29)$$

En convenant que les champs physiques correspondent à la partie réelle des grandeurs complexes, on suppose généralement, pour une onde plane électromagnétique, que le potentiel vecteur possède la forme suivante :

$$\mathbf{A} = \hat{\mathbf{e}}_x A_{x0}(\omega_0 t - k_0 z) e^{i(\omega_0 t - k_0 z)} , \quad (2.30)$$

où  $k_0$  et  $\omega_0$  sont reliés par la relation de dispersion dans le vide  $\omega_0/k_0 = c$  et  $A_{x0}$  est une fonction d'amplitude qui varie en fonction de la phase  $\omega_0 t - k_0 z$ .

À l'aide des relations (2.27), on peut exprimer les équations (2.8) et (2.9) en fonction du potentiel vecteur :

$$\frac{d(\gamma m_e \mathbf{v})}{dt} = -e \left( -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{v} \times \nabla \times \mathbf{A} \right) , \quad (2.31)$$

$$\frac{d(\gamma m_e c^2)}{dt} = e \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} . \quad (2.32)$$

En définissant les quantités sans dimension  $\beta = \mathbf{v}/c$  et  $\mathbf{a} = e\mathbf{A}/m_e c$ , on peut réécrire les deux équations précédentes sous forme scalaire et adimensionnelle :

$$\frac{d(\gamma \beta_x)}{dt} = \frac{\partial a_x}{\partial t} + c \beta_z \frac{\partial a_x}{\partial z} = \frac{da_x}{dt} , \quad (2.33)$$

$$\frac{d(\gamma \beta_y)}{dt} = 0 , \quad (2.34)$$

$$\frac{d(\gamma \beta_z)}{dt} = -c \beta_x \frac{\partial a_x}{\partial z} = \beta_x \frac{\partial a_x}{\partial t} , \quad (2.35)$$

$$\frac{d\gamma}{dt} = \beta_x \frac{\partial a_x}{\partial t} . \quad (2.36)$$

Ces quatre équations nous permettent d'identifier rapidement les trois intégrales du mouvement<sup>5</sup>, données respectivement par l'équation (2.33), l'équation (2.34) et la différence entre les équations (2.35) et (2.36) :

$$\frac{d}{dt}(\gamma \beta_x - a_x) = 0 \quad , \quad \frac{d}{dt}(\gamma \beta_y) = 0 \quad , \quad \frac{d}{dt}(\gamma - \gamma \beta_z) = 0 . \quad (2.37)$$

Si on considère un électron se déplaçant initialement à la vitesse  $\beta_i$  à  $t \rightarrow -\infty$  à l'extérieur d'une onde plane de durée finie ( $a_{x,i} \rightarrow 0$ , où  $a_{x,i}$  est la valeur du potentiel vecteur à la position initiale de l'électron), l'intégration des équations (2.37) permet d'obtenir les relations suivantes :

$$\gamma \beta_x = a_x + \gamma_i \beta_{x,i} \quad , \quad \gamma \beta_y = \gamma_i \beta_{y,i} \quad , \quad \gamma(1 - \beta_z) = \gamma_i(1 - \beta_{z,i}) . \quad (2.38)$$

---

5. Comme ce système à trois degrés de liberté possède trois intégrales du mouvement indépendantes, on peut dire qu'il s'agit d'un système intégrable [121].



Avec la définition du facteur gamma,  $\gamma^{-2} = 1 - \beta_x^2 - \beta_y^2 - \beta_z^2$ , et un peu d'algèbre, on peut exprimer la solution complète pour les moments et l'énergie de l'électron en fonction des conditions initiales et du potentiel vecteur :

$$\gamma\beta_x = a_x + \gamma_i\beta_{x,i} \quad , \quad \gamma\beta_y = \gamma_i\beta_{y,i} \quad , \quad (2.39)$$

$$\gamma\beta_z = \gamma_i\beta_{z,i} + \frac{a_x^2 + 2a_x\gamma_i\beta_{x,i}}{2\gamma_i(1 - \beta_{z,i})} \quad , \quad \gamma = \gamma_i + \frac{a_x^2 + 2a_x\gamma_i\beta_{x,i}}{2\gamma_i(1 - \beta_{z,i})} . \quad (2.40)$$

À la lumière de cette solution analytique, le constat suivant s'impose : un électron ne peut être accéléré par une onde plane de durée finie. En effet, puisque l'électron se déplace toujours à une vitesse inférieure à celle de l'onde plane, qui elle se déplace à la vitesse  $c$ , le potentiel vecteur à la position de l'électron tend inévitablement vers  $a_x \rightarrow 0$  lorsque  $t \rightarrow \infty$ . Bien que l'énergie de l'électron soit soumise à une variation temporelle lors de son interaction avec l'onde plane, on obtient  $\gamma \rightarrow \gamma_i$  lorsque  $t \rightarrow \infty$ .

Le résultat obtenu dans cette section est en accord avec le théorème de Lawson-Woodward. En effet, même s'il vaut également pour un électron initialement non relativiste (ce qui viole la condition 2) ou pour une onde plane avec  $a_x \gg 1$  (ce qui viole la condition 5), cela n'entre pas en contradiction avec le théorème. En effet, ce dernier stipule que le gain en énergie sera nul si les conditions 1 à 5 sont respectées ; dans le cas contraire, rien n'est garanti. Le fait qu'un électron soit incapable d'extraire de l'énergie d'une onde plane de durée finie, peu importe son énergie initiale et l'amplitude de l'onde, provient des propriétés de la dynamique telle que dictée par les intégrales du mouvement données à l'équation (2.37).

Afin d'arriver à accélérer un électron dans le vide à l'aide d'une impulsion laser, il apparaît nécessaire, en plus de violer au moins une des conditions du théorème de Lawson-Woodward, d'utiliser un faisceau qui diffère d'une onde plane transverse. Comme nous le verrons bientôt, l'utilisation d'un faisceau  $TM_{01}$  est une des solutions possibles à ce problème.

## 2.2 L'impulsion $TM_{01}$ paraxiale

Une des méthodes permettant de briser la symétrie du mouvement d'une charge dans une onde plane consiste à utiliser un faisceau focalisé, c'est-à-dire un faisceau dont le champ électromagnétique possède un certain degré de confinement spatial. C'est le cas du faisceau de type  $TM_{01}$  qui fait figure d'élément central dans cette thèse.

Cette section et la suivante ont pour but d'introduire le formalisme qui permet de modéliser une impulsion laser  $TM_{01}$ . Dans cette première section, on obtient une solution approximative pour l'impulsion  $TM_{01}$  en solutionnant les équations de Maxwell sous l'approximation paraxiale et l'approximation de l'enveloppe lente. Une technique permettant de solutionner de manière rigoureuse les équations de Maxwell et ainsi d'obtenir une solution exacte pour l'impulsion  $TM_{01}$  est présentée à la section

suivante. Bien que les travaux présentés dans cette thèse soient basés en très grande majorité sur l'utilisation de la solution exacte pour l'impulsion  $\text{TM}_{01}$ , nous croyons qu'il est pertinent de présenter en premier lieu la solution paraxiale. En plus du caractère historique que revêt la solution paraxiale dans le cadre de la modélisation de l'accélération d'électrons, elle permet également de faire ressortir plus facilement différentes propriétés importantes du mode  $\text{TM}_{01}$ .

Dans la littérature, on répertorie deux techniques différentes permettant d'obtenir l'expression du champ électromagnétique de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  paraxiale. La première consiste à solutionner directement les équations de Maxwell via une inversion formelle de l'équation de la divergence [179, 180]. La seconde est basée sur l'utilisation du potentiel vecteur magnétique dans la jauge de Lorenz [111, 138]. Dans cette thèse, nous avons choisi d'employer une troisième technique, soit la méthode des vecteurs de Hertz. Bien que différente des deux méthodes susmentionnées, elle s'apparente à la méthode du potentiel vecteur magnétique puisqu'elle fait intervenir des fonctions potentielles électromagnétiques. L'utilisation de la méthode des vecteurs de Hertz pour obtenir les champs de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  paraxiale assurera une transition plus harmonieuse avec la théorie présentée dans la section §2.3, et permettra de faire ressortir davantage la cohérence de la démarche.

### 2.2.1 La méthode des vecteurs de Hertz

Afin de modéliser une impulsion laser, les équations de Maxwell (2.1)–(2.4) doivent être solutionnées pour le champ électrique et le champ magnétique. Dans la plupart des cas, il est extrêmement difficile d'obtenir une solution en travaillant directement avec les champs physiques  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$ . Une technique couramment utilisée consiste à introduire des fonctions potentielles électromagnétiques pour lesquelles une solution simple existe. Les fonctions potentielles permettent ensuite, via quelques opérations algébriques, d'obtenir les champs physiques. Un exemple de fonction potentielle est le potentiel vecteur magnétique introduit à la section §2.1.5.

Les vecteurs de Hertz, aussi appelés potentiels de Hertz ou potentiels de polarisation, sont des fonctions potentielles électromagnétiques qui s'avèrent utiles pour générer des solutions de type transverse magnétique<sup>6</sup> (TM) et transverse électrique<sup>7</sup> (TE) aux équations de Maxwell. Les vecteurs de Hertz, notés  $\mathbf{\Pi}_e(\mathbf{r}, t)$  (vecteur de Hertz électrique) et  $\mathbf{\Pi}_m(\mathbf{r}, t)$  (vecteur de Hertz magnétique), sont reliés aux champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  par les relations suivantes [24] :

$$\mathbf{E} = \nabla \times \nabla \times \mathbf{\Pi}_e - \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{\Pi}_m \quad , \quad \mathbf{B} = \nabla \times \nabla \times \mathbf{\Pi}_m + \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{\Pi}_e . \quad (2.41)$$

À l'aide de ces expressions, on peut montrer qu'ils satisfont tous les deux à l'équation d'onde homogène,

$$\nabla^2 \mathbf{\Pi}_e - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{\Pi}_e}{\partial t^2} = \mathbf{0} \quad , \quad \nabla^2 \mathbf{\Pi}_m - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{\Pi}_m}{\partial t^2} = \mathbf{0} . \quad (2.42)$$

---

6. Un faisceau TM est un faisceau pour lequel le champ magnétique est confiné dans le plan perpendiculaire à l'axe de propagation.

7. Un faisceau TE est un faisceau pour lequel le champ électrique est confiné dans le plan perpendiculaire à l'axe de propagation.

La méthode des vecteurs de Hertz consiste à considérer que les vecteurs de Hertz sont linéairement polarisés [7]. De cette manière, il suffit d'obtenir une solution à l'équation d'onde scalaire pour la composante non nulle de chaque potentiel. Cette étape s'avère généralement beaucoup plus facile que de solutionner directement les équations de Maxwell pour les champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  qui possèdent, eux, souvent plus d'une composante non nulle. Comme le montrent les équations (2.41), quelques opérations algébriques simples permettent ensuite d'obtenir les champs physiques à partir des potentiels.

Le choix de la polarisation des vecteurs de Hertz dépend de l'état de polarisation physique que l'on souhaite générer [7]. Pour un faisceau de type TE se propageant selon l'axe  $z$ , le vecteur  $\mathbf{\Pi}_e$  est nul et le vecteur  $\mathbf{\Pi}_m$  est orienté selon l'axe  $z$ . Pour un faisceau de type TM se propageant selon l'axe  $z$ , il s'agit du contraire : le vecteur  $\mathbf{\Pi}_e$  est orienté selon  $z$  et le vecteur  $\mathbf{\Pi}_m$  est nul. Il est également possible de générer un faisceau de polarisation linéaire se propageant selon l'axe  $z$  lorsque  $\mathbf{\Pi}_e$  et  $\mathbf{\Pi}_m$  sont d'amplitude équivalente et sont orientés orthogonalement dans le plan  $(x, y)$ .

## 2.2.2 L'approximation paraxiale et l'approximation de l'enveloppe lente

Pour générer un faisceau de type TM, on doit utiliser un vecteur de Hertz électrique orienté selon l'axe  $z$ , soit  $\mathbf{\Pi}_e = \hat{\mathbf{e}}_z \Psi(\mathbf{r}, t)$ . La fonction  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  doit ainsi satisfaire à l'équation d'onde scalaire :

$$\nabla^2 \Psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = 0. \quad (2.43)$$

En utilisant les coordonnées cylindriques  $(r, \phi, z)$ , on pose une solution de la forme

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(r, \phi, z) g(\xi) e^{i(\xi - \phi_0)}, \quad (2.44)$$

où  $\xi = \omega_0 t - k_0 z$  est la phase spatiotemporelle,  $\omega_0 = ck_0$  est la fréquence centrale,  $\phi_0$  est une phase constante,  $\psi(r, \phi, z)$  représente un profil spatial et  $g(\xi)$  une enveloppe temporelle. En insérant cette solution dans l'équation (2.43), on obtient après quelques manipulations algébriques

$$\nabla_{\perp}^2 \psi + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - 2ik_0 \frac{\partial \psi}{\partial z} \left( 1 - \frac{i}{g} \frac{dg}{d\xi} \right) = 0, \quad \nabla_{\perp}^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (2.45)$$

À partir de cette équation, nous allons effectuer deux approximations. La première, dite *approximation de l'enveloppe lente*, consiste à considérer que l'enveloppe temporelle  $g(\xi)$  varie lentement en fonction de la phase  $\xi$ . Mathématiquement, cette approximation se traduit par

$$\left| \frac{1}{g} \frac{dg}{d\xi} \right| \ll 1. \quad (2.46)$$

La seconde approximation, dite *approximation paraxiale*, consiste à considérer que la variation axiale du profil spatial  $\psi(r, \phi, z)$  est faible sur une distance de l'ordre de la longueur d'onde, et qu'elle est également faible en comparaison à sa variation transverse, qui provient du confinement du faisceau près de l'axe optique. Cette hypothèse permet d'effectuer l'approximation suivante :

$$\left| \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right| \ll \left| 2k_0 \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|, \quad \left| \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \right|, \quad \left| \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right|. \quad (2.47)$$

Ces deux approximations permettent d'obtenir, à partir de l'équation (2.45), l'équation d'onde paraxiale

$$\nabla_{\perp}^2 \psi - 2ik_0 \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0. \quad (2.48)$$

En géométrie cylindrique, la solution générale de l'équation d'onde paraxiale correspond aux modes Laguerre-Gauss élégants paraxiaux [5] :

$$u_{p,m}^e(r, \phi, z) = K_{p,m} \frac{(iz_R)^{p+m+1}}{(z + iz_R)^{p+m+1}} \frac{r^m}{w_0^m} L_p^m \left[ \frac{ik_0 r^2}{2(z + iz_R)} \right] \exp \left[ -\frac{ik_0 r^2}{2(z + iz_R)} \right] \cos(m\phi), \quad (2.49)$$

où  $p = 0, 1, 2, \dots$  est le numéro radial du mode,  $m = 0, 1, 2, \dots$  est son numéro azimutal,  $K_{p,m}$  est une constante d'amplitude,  $z_R = k_0 w_0^2 / 2$  est la distance de Rayleigh,  $w_0$  est la taille du faisceau dans le plan de l'étranglement ( $z = 0$ ) et  $L_p^m(\cdot)$  est le polynôme associé de Laguerre [10]. L'exposant  $e$ , pour *even*, indique qu'il s'agit du mode pair ; le mode impair,  $u_{p,m}^o(r, \phi, z)$ , s'obtient en remplaçant  $\cos(m\phi)$  par  $\sin(m\phi)$ .

### 2.2.3 Champ électromagnétique de l'impulsion $\text{TM}_{01}$ paraxiale

De manière générale, on définit le faisceau  $\text{TM}_{p,m+1}$  paraxial comme étant le faisceau généré par le mode Laguerre-Gauss élégant paraxial d'ordre  $(p, m)$ . Le faisceau  $\text{TM}_{01}$  paraxial correspond au mode transverse magnétique fondamental et est généré par le mode  $u_{0,0}$ , communément dit faisceau gaussien paraxial [149] :

$$\psi(r, \phi, t) = u_{0,0}(r, \phi, z) = \frac{\Psi_0}{z + iz_R} \exp \left[ -\frac{ik_0 r^2}{2(z + iz_R)} \right], \quad (2.50)$$

où  $\Psi_0$  est une constante d'amplitude. Avec un peu d'algèbre, on peut montrer que le faisceau gaussien satisfait l'approximation paraxiale si les conditions suivantes sont respectées :

$$k_0 z_R \gg 1 \quad \text{et} \quad r^2 \ll 4(z^2 + z_R^2). \quad (2.51)$$

Physiquement, la première condition implique une faible focalisation, tandis que la seconde indique que la solution n'est valide que près de l'axe optique. Dans la littérature sur l'accélération d'électrons, il est généralement accepté que l'approximation paraxiale est valide lorsque  $w_0 \geq 2.5\lambda_0$ , ce qui correspond environ à  $k_0 z_R \geq 120$  [48, 180, 186, 188].

Afin d'obtenir un faisceau  $\text{TM}_{01}$  pulsé, la fonction  $\psi(r, \phi, t)$  doit être multipliée par une enveloppe temporelle. Deux cas seront considérés à un point ou à un autre dans cette thèse. Le premier est celui de l'enveloppe gaussienne [48, 179] :

$$g(\xi) = \exp \left[ -\frac{(\omega_0 t - k_0 z)^2}{\omega_0^2 T^2} \right]. \quad (2.52)$$

La constante  $T$  détermine la durée de l'impulsion ; l'enveloppe gaussienne décroît d'un facteur  $1/e$  après un temps  $T_{1/e} = T$  et sa pleine largeur à mi-hauteur vaut  $T_{\text{fwhm}} = 2T(\ln 2)^{1/2}$ . Afin que l'enve-

loppe gaussienne respecte l'approximation de l'enveloppe lente, la condition suivante doit être satisfaite :

$$\left| \frac{1}{g} \frac{dg}{d\xi} \right| = \frac{2|\omega_0 t - k_0 z|}{\omega_0^2 T^2} \ll 1. \quad (2.53)$$

L'approximation de l'enveloppe lente sera ainsi valide pour des valeurs suffisamment grandes de  $\omega_0 T$ , et de surcroît pour une faible valeur de la phase  $|\omega_0 t - k_0 z|$ , c'est-à-dire près de la crête de l'impulsion.

Le fait que l'enveloppe gaussienne ne respecte l'approximation de l'enveloppe lente que lorsque le point d'observation est près de la crête de l'impulsion peut être considéré comme un désavantage par certains [111]. Afin de remédier à cette situation, une enveloppe de forme sécante hyperbolique peut être utilisée [111, 186] :

$$g(\xi) = \operatorname{sech} \left( \frac{\omega_0 t - k_0 z}{\xi_0} \right). \quad (2.54)$$

La constante  $\xi_0$  détermine la durée de l'impulsion ; l'enveloppe en sécante hyperbolique décroît d'un facteur  $1/e$  après un temps  $T_{1/e} = (\xi_0/\omega_0) \operatorname{sech}^{-1}(1/e)$  et sa pleine largeur à mi-hauteur vaut  $T_{\text{fwhm}} = 2(\xi_0/\omega_0) \operatorname{sech}^{-1}(1/2)$ . On peut montrer que l'enveloppe en sécante hyperbolique satisfait à la condition de validité de l'approximation de l'enveloppe lente pour toute valeur de la phase, pourvu que  $\xi_0 \gg 1$ . Mentionnons qu'en ce qui concerne l'accélération d'électrons, il a été démontré que les enveloppes gaussienne et sécante hyperbolique mènent à des résultats essentiellement similaires [97].

En considérant une enveloppe gaussienne, le vecteur de Hertz électrique  $\mathbf{\Pi}_e$  permettant de générer une impulsion  $\text{TM}_{01}$  paraxiale peut ainsi s'écrire  $\mathbf{\Pi}_e(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{e}}_z \Psi(r, z, t)$  avec

$$\Psi(r, z, t) = \frac{\Psi_0}{z + iz_R} \exp \left[ -\frac{ik_0 r^2}{2(z + iz_R)} \right] \exp \left[ -\frac{(\omega_0 t - k_0 z)^2}{\omega_0^2 T^2} \right] e^{i(\omega_0 t - k_0 z - \phi_0)}. \quad (2.55)$$

D'après les définitions (2.41), les trois composantes non nulles du champ électromagnétique de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  peuvent s'obtenir à partir des dérivées suivantes :

$$E_r = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial r}, \quad E_z = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}, \quad B_\phi = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t \partial r}. \quad (2.56)$$

En ne conservant que le terme dominant de chaque composante du champ, on obtient :

$$E_r(r, z, t) = -\frac{k_0^2 \Psi_0}{(z + iz_R)^2} r \exp \left[ -\frac{ik_0 r^2}{2(z + iz_R)} \right] \exp \left[ -\frac{(\omega_0 t - k_0 z)^2}{\omega_0^2 T^2} \right] e^{i(\omega_0 t - k_0 z - \phi_0)} = c B_\phi(r, z, t), \quad (2.57)$$

$$E_z(r, z, t) = \frac{2ik_0 \Psi_0}{(z + iz_R)^2} \left[ 1 - \frac{ik_0 r^2}{2(z + iz_R)} \right] \exp \left[ -\frac{ik_0 r^2}{2(z + iz_R)} \right] \exp \left[ -\frac{(\omega_0 t - k_0 z)^2}{\omega_0^2 T^2} \right] e^{i(\omega_0 t - k_0 z - \phi_0)}. \quad (2.58)$$

Ces expressions sont identiques à celles qui peuvent être obtenues par les deux méthodes alternatives mentionnées au début de la section §2.2 (comparer par exemple avec [138] et [179]). Notons que les champs physiques correspondent à la partie réelle des quantités complexes.

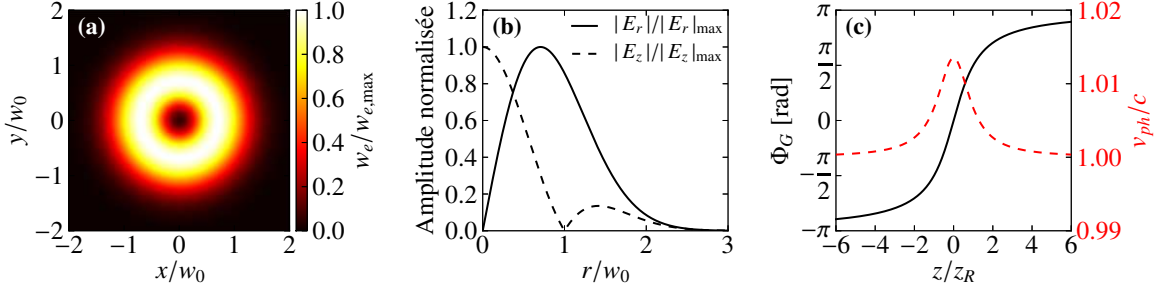


Figure 2.1 – Impulsion  $\text{TM}_{01}$  paraxiale avec  $k_0 z_R = 150$ . (a) Profil de la densité d'énergie électrique  $w_e$  dans le plan de l'étranglement à  $t = 0$ . (b) Amplitude normalisée du champ électrique radial et du champ électrique longitudinal dans le plan de l'étranglement à  $t = 0$ . (c) Déphasage de Gouy (axe de gauche) et vitesse de phase (axe de droite) sur l'axe optique en fonction de la coordonnée longitudinale.

La puissance moyenne  $P$  de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  peut être calculée en intégrant la norme de la composante  $z$  du vecteur de Poynting moyen,  $\mathbf{S}_{av} = (2\mu_0)^{-1} \mathbf{E} \times \mathbf{B}^*$ , dans le plan transverse à  $z = 0$  et  $t = 0$  :

$$P = \iint \mathbf{S}_{av} \cdot \hat{\mathbf{e}}_z dS = \frac{1}{2\mu_0} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \text{Re} \{ E_r(r, 0, 0) B_\phi^*(r, 0, 0) \} r d\phi dr = \frac{\pi k_0^2 |\Psi_0|^2}{2\eta_0 z_R^2}, \quad (2.59)$$

où l'étoile dénote le complexe conjugué et  $\eta_0 = \sqrt{\mu_0/\epsilon_0}$  est l'impédance du vide. La puissance moyenne correspond à la moitié de la puissance crête de l'impulsion.

La densité d'énergie électrique, définie comme  $w_e = \epsilon_0 |\mathbf{E}|^2/2$ , de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  paraxiale présente un profil en forme de beigne dans le plan transverse [voir figure 2.1(a)]. La composante radiale du champ électrique possède un maximum à  $r = w_0/\sqrt{2}$ , tandis que la composante longitudinale possède un maximum à  $r = 0$  [voir figure 2.1(b)]. Le rapport entre l'amplitude maximale du champ longitudinal et du champ radial vaut

$$\frac{|E_z|_{\max}}{|E_r|_{\max}} = \frac{2 \exp(1/2)}{\sqrt{k_0 z_R}}, \quad (2.60)$$

une valeur qui demeure inférieure à l'unité dans les limites de validité de l'approximation paraxiale ( $k_0 z_R \gg 1$ ).

Une autre caractéristique importante de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  est la présence d'un déphasage de Gouy [149]. Pour mettre ce dernier en évidence, on peut exprimer le champ longitudinal  $E_z$  sous forme polaire,  $E_z(r, z, t) = A(r, z, t) \exp[i\Phi(r, z, t)]$ . La phase totale vaut alors :

$$\Phi(r, z, t) = \omega_0 t - k_0 z + 2 \arctan\left(\frac{z}{z_R}\right) - \arctan\left[\frac{k_0 r^2 z}{2(z^2 + z_R^2) - k_0 r^2 z_R}\right] - \frac{k_0 r^2 z}{2(z^2 + z_R^2)} - \phi_0 - \frac{\pi}{2}. \quad (2.61)$$

Sur l'axe optique, à  $r = 0$ , la phase vaut :

$$\Phi(r = 0, z, t) = \omega_0 t - k_0 z + 2 \arctan\left(\frac{z}{z_R}\right) - \phi_0 - \frac{\pi}{2}. \quad (2.62)$$

Le terme  $\Phi_G \equiv 2 \arctan(z/z_R)$  correspond au déphasage de Gouy et fait en sorte que le champ accumule, sur l'axe de propagation, un déphasage égal à  $2\pi$  entre  $\zeta \rightarrow -\infty$  et  $\zeta \rightarrow +\infty$ . L'existence du déphasage de Gouy implique que l'impulsion possède une vitesse de phase axiale supralumineuse au voisinage de l'étranglement <sup>8</sup> :

$$v_{ph} = c \left[ 1 - \frac{2}{k_0 z_R (1 + z^2/z_R^2)} \right]^{-1}. \quad (2.63)$$

Le déphasage de Gouy et la vitesse de phase du faisceau  $TM_{01}$  sont illustrés à la figure 2.1(c). Comme nous le verrons bientôt, ces deux éléments jouent un rôle important lors de l'accélération d'électrons.

#### 2.2.4 Génération expérimentale d'un faisceau $TM_{01}$

Différentes techniques peuvent être utilisées pour générer des faisceaux laser de polarisation radiale en laboratoire. On peut diviser ces approches en deux catégories [194] : les approches *actives*, pour lesquelles on force la cavité laser à osciller dans un mode de polarisation radiale ou azimutale <sup>9</sup>, et les approches *passives*, qui sont basées sur une conversion de l'état de polarisation à l'extérieur de la cavité laser.

Un faisceau de polarisation radiale peut être généré à l'intérieur d'une cavité laser en y insérant des éléments optiques qui possèdent une symétrie axiale et qui éliminent le mode fondamental gaussien. En général, la symétrie axiale de la polarisation permet toutefois aux modes  $TM_{01}$  et  $TE_{01}$  de survivre simultanément. Pour discriminer en faveur d'un seul d'entre eux, il est possible d'utiliser des composantes spéciales tel qu'un cristal présentant une biréfringence axiale [95, 129, 191], un réflecteur à angle de Brewster [83] ou un élément diffractif spécial [120]. Par ailleurs, la génération active d'impulsions brèves de polarisation radiale est également possible à l'aide d'une cavité munie d'un cristal de Ti:saphir possédant une coupe particulière [76].

Il est également possible de générer des faisceaux de polarisation radiale en espace libre à l'extérieur de la cavité laser. Cette approche, qui permet de travailler avec des systèmes laser commerciaux, consiste à convertir la polarisation du mode fondamental linéairement polarisé qu'émettent la majorité des cavités laser. La méthode qui s'avère conceptuellement la plus simple est de combiner de manière cohérente deux modes Laguerre-Gausse d'ordre (0,1) de parité différente et de polarisation croisée à l'aide d'un interféromètre de Mach-Zehnder [166]. Il est également possible d'utiliser des fenêtres à base de cristaux liquides qui permettent de convertir une polarisation linéaire en polarisation radiale en effectuant une rotation continue de la polarisation autour de l'axe optique [112, 157]. Bien que ces éléments permettent d'atteindre une très grande pureté modale, ils ne fonctionnent qu'à basse puissance laser. Pour la production d'impulsions ultrabrèves de polarisation radiale à partir de systèmes laser de haute puissance, on utilise généralement un convertisseur de polarisation constitué d'un arrangement

8. Pour calculer la vitesse de phase axiale, on pose d'abord  $\Phi(r=0, z, t) = \text{cte}$ . On prend ensuite la dérivée par rapport au temps de chaque côté et on isole  $dz/dt$ , qui correspond à la quantité recherchée.

9. Un mode transverse électrique  $TE_{01}$  (polarisation azimutale) peut être converti en mode  $TM_{01}$  par une rotation de  $\pi/2$  de la polarisation locale.

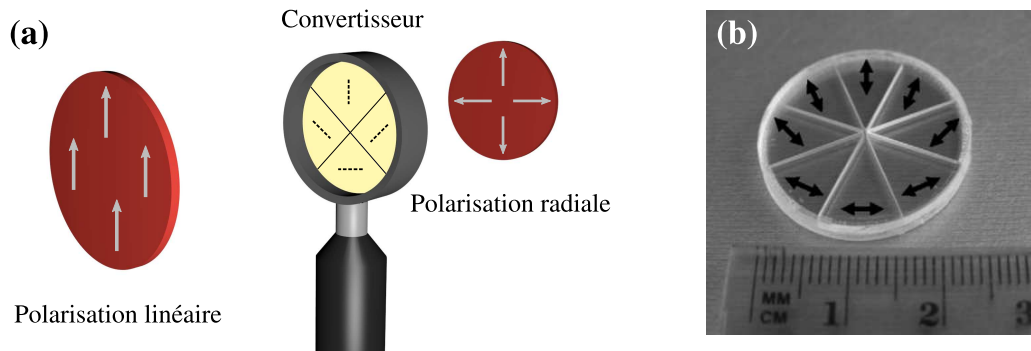


Figure 2.2 – Principe de fonctionnement d’un convertisseur de polarisation à lames demi-onde. (a) Schéma d’un convertisseur à quatre lames demi-onde qui permet de convertir un faisceau de polarisation linéaire en faisceau de polarisation radiale. Les lignes pointillées sur le convertisseur indiquent l’orientation de l’axe cristallin de chaque lame. (b) Convertisseur de polarisation à huit lames demi-onde (photo tirée de [94]).

de lames demi-onde (voir figure 2.2) [40, 94]. C’est d’ailleurs ce type de convertisseur de polarisation qui a été utilisé lors de la première démonstration expérimentale de l’accélération d’électrons par impulsions  $TM_{01}$  [126].

### 2.3 L’impulsion $TM_{01}$ exacte

Les systèmes laser de haute puissance permettent aujourd’hui de générer des impulsions dont la durée n’est que de quelques cycles optiques. À l’aide d’optiques de focalisation à grande ouverture numérique, il est possible de focaliser ces impulsions sur une tache dont la taille est comparable à la longueur d’onde. Pour décrire ces impulsions ultrabrèves et fortement focalisées, l’approximation paraxiale et l’approximation de l’enveloppe lente sont inadéquates ; il devient nécessaire d’obtenir des solutions *exactes* aux équations de Maxwell.

La modélisation d’impulsions ultrabrèves et fortement focalisées est un domaine de recherche en soi, et différentes méthodes ont été proposées pour obtenir des solutions rigoureuses caractérisant leur champ électromagnétique. Les articles mentionnés à la section §1.3 ayant analysé l’accélération d’électrons en régime d’impulsions ultrabrèves ou non paraxiales peuvent être divisés en trois catégories selon la méthode employée pour décrire le champ électromagnétique de l’impulsion. La première de ces catégories utilise une approche perturbative qui consiste à obtenir une solution à l’équation d’onde sous la forme d’une série de puissances dont le terme d’ordre zéro est la solution à l’équation d’onde paraxiale [35, 139, 179]. Cette approche, aussi connue sous le nom de méthode de Lax [88], ne garantit toutefois pas toujours une bonne convergence des séries (voir par exemple [35]). La seconde catégorie est basée sur l’utilisation d’une représentation intégrale du champ électromagnétique, comme les intégrales de Stratton-Chu [21] ou la méthode du spectre d’ondes planes [92]. Finalement, la troisième catégorie correspond aux simulations de type *particle-in-cell*, qui font intervenir, comme nous le verrons au chapitre 3, une résolution des équations de Maxwell par une méthode aux



différences finies.

Ces trois catégories d’approches ont en commun qu’elles nécessitent des ressources numériques importantes étant donné que le calcul du champ électromagnétique à chaque point de l’espace et à chaque instant requiert plusieurs opérations arithmétiques. Elles rendent ainsi très coûteuse l’analyse de l’effet des multiples paramètres laser sur la dynamique d’accélération.

Dans le cadre de ses travaux de doctorat sous la direction du Prof. Michel Piché, Alexandre April a développé une stratégie simple et complète permettant d’obtenir des solutions exactes sous forme fermée aux équations de Maxwell [8]. Cette approche consiste en trois ingrédients principaux, soit la méthode des vecteurs de Hertz, le modèle des source/puits ponctuels complexes et le spectre de Poisson. L’utilisation d’une solution exacte sous forme fermée laisse entrevoir un avantage énorme du point de vue numérique : une fois que cette solution est obtenue analytiquement, l’évaluation du champ électromagnétique ne requiert guère plus de temps que ce qui est requis par la solution paraxiale. Pour cette raison, la méthode d’April sera utilisée dans cette thèse pour modéliser de manière exacte les impulsions  $TM_{01}$ .

Dans cette section, nous présentons l’essentiel de la méthode d’April et retraçons brièvement les étapes menant à l’obtention d’une solution sous forme fermée pour le champ électromagnétique d’une impulsion  $TM_{01}$  ultrabrève et non paraxiale.

### 2.3.1 Modèle des source/puits ponctuels complexes

À la section §2.2.1, nous avons expliqué comment il est possible, à l’aide de la méthode des vecteurs de Hertz, de modéliser un faisceau laser de type transverse magnétique (TM) se propageant selon l’axe  $z$ . La procédure consiste à utiliser un vecteur de Hertz électrique polarisé dans la direction  $z$ , soit  $\mathbf{\Pi}_e(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{e}}_z \Psi(\mathbf{r}, t)$ , qui est solution à l’équation d’onde (2.43). Précédemment, nous avons solutionné cette équation en effectuant l’approximation paraxiale et l’approximation de l’enveloppe lente ; cette fois, nous souhaitons en obtenir une solution exacte.

En premier lieu, il convient de travailler dans le domaine spectral. En prenant la transformée de Fourier temporelle de l’équation (2.43), on obtient l’équation de Helmholtz pour la composante de fréquence  $\omega$ , dénotée  $\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega)$  :

$$\nabla^2 \tilde{\Psi} + k^2 \tilde{\Psi} = 0 . \quad (2.64)$$

La solution la plus simple à l’équation de Helmholtz est l’onde sphérique<sup>10</sup>,  $e^{\pm ikR}/R$ , où  $R = [r^2 + (z - z_s)^2]^{1/2}$  représente le rayon de courbure sphérique et  $z_s$  correspond à la position du point source sur l’axe  $z$ . L’onde sphérique est toutefois un piètre modèle de faisceau optique étant donné qu’elle ne représente pas une solution qui possède un confinement transversal autour d’un axe de propagation.

---

10. Plus exactement, l’onde sphérique correspond à la fonction de Green de l’équation de Helmholtz en trois dimensions.

Une méthode simple permettant d'obtenir une solution de l'équation de Helmholtz avec un confinement transversal consiste à déplacer le point source sur l'axe imaginaire <sup>11</sup>, c'est-à-dire à  $z_s = -ia$  [39]. À partir de l'onde sphérique, on obtient un faisceau convergent, noté  $\tilde{\Psi}^+(\mathbf{r}, \omega) = e^{ik\tilde{R}}/\tilde{R}$ , et un faisceau divergent, noté  $\tilde{\Psi}^- = e^{-ik\tilde{R}}/\tilde{R}$ , où  $\tilde{R} = [r^2 + (z + ia)^2]^{1/2}$  représente le rayon de courbure complexe. Les solutions  $\tilde{\Psi}^\pm$  prises seules présentent cependant deux difficultés mathématiques, soit une singularité annulaire à  $r = a$  dans le plan  $z = 0$  et une discontinuité axiale à  $z = 0$  [146]; elles ne représentent donc pas des faisceaux optiques physiquement réalisables.

Le modèle des source/puits ponctuels complexes est une manière simple permettant de remédier à ces difficultés [171]. Il consiste à superposer une onde divergente (source) et une onde convergente (puits) dont la source est localisée à  $z_s = -ia$ , ce qui permet d'obtenir un faisceau ne possédant aucune singularité ni discontinuité :

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) = \Psi_0 e^{-ka} \left( \frac{e^{-ik\tilde{R}}}{\tilde{R}} - \frac{e^{ik\tilde{R}}}{\tilde{R}} \right) = -2ik \Psi_0 e^{-ka} \frac{\sin(k\tilde{R})}{k\tilde{R}}, \quad (2.65)$$

où  $\Psi_0$  est une constante d'amplitude et  $e^{-ka}$  est un facteur permettant d'assurer la continuité avec le régime paraxial. Le faisceau décrit à l'équation (2.65) est dit faisceau gaussien non paraxial.

L'analyse du faisceau gaussien non paraxial se fait plus naturellement dans un système de coordonnées sphéroïdales aplaties [86]. Le paramètre  $a$  apparaissant dans l'équation (2.65) peut, dans ce système de coordonnées, être associé au paramètre confocal. Physiquement, la quantité  $ka$ , dite paramètre confocal normalisé, détermine le degré de focalisation du faisceau optique et peut être associée aux paramètres physiques  $w_0$  et  $z_R$  à fréquence  $\omega$  par la relation suivante [134] :

$$kz_R = \frac{k^2 w_0^2}{2} = [1 + (ka)^2]^{1/2} - 1. \quad (2.66)$$

Dans la limite paraxiale, c'est-à-dire lorsque  $ka \gg 1$ , on peut démontrer que le faisceau gaussien non paraxial tend vers le faisceau gaussien paraxial <sup>12</sup> :

$$\lim_{ka \gg 1} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) \approx \frac{\Psi_0}{z + ia} \exp \left[ -\frac{ikr^2}{2(z + ia)} \right] e^{-ikz}. \quad (2.67)$$

On voit dans ces deux dernières expressions que  $z_R \approx a$  lorsque  $ka \gg 1$ . En quelque sorte, le paramètre  $a$  peut ainsi être considéré comme une généralisation non paraxiale de la distance de Rayleigh.

Il existe également des solutions exactes à l'équation de Helmholtz pour les modes d'ordres supérieurs, comme par exemple les modes Laguerre-Gauss élégants non paraxiaux [4] dont l'expression paraxiale a été donnée à la section §2.2.2. Cependant, comme nous nous intéressons au mode transverse magnétique fondamental (le mode  $\text{TM}_{01}$ ), seul le faisceau gaussien non paraxial sera nécessaire dans notre démarche.

11. Bien que nous ayons passé ce fait sous silence à la section §2.2.3, cette technique permet également d'obtenir le faisceau gaussien paraxial à partir de l'onde parabolique, qui est la solution fondamentale de l'équation d'onde paraxiale [149]

12. Pour ce faire, on utilise l'approximation  $\tilde{R} \approx (z + ia) + r^2/2(z + ia)$ . Le second terme n'est conservé que dans l'exponentielle; au dénominateur, on utilise plutôt l'approximation  $\tilde{R} \approx z + ia$  [149]

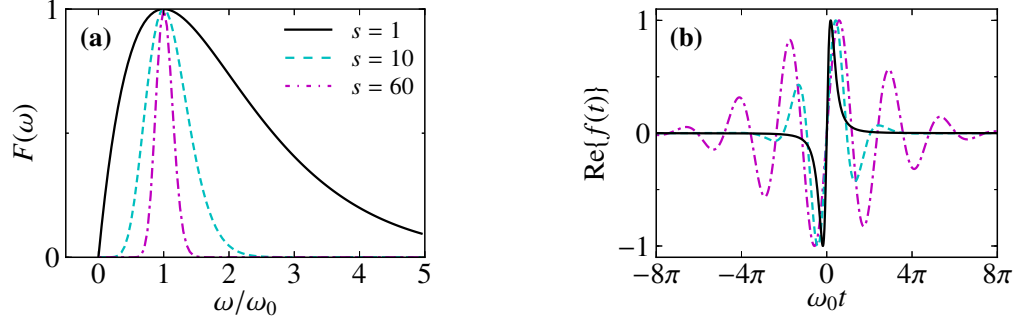


Figure 2.3 – (a) Spectre de Poisson  $F(\omega)$  et (b) profil temporel  $\text{Re}\{f(t)\}$  pour différentes valeurs du paramètre  $s$ .

### 2.3.2 Le spectre de Poisson

Dans la section précédente, nous avons obtenu l'expression du faisceau gaussien non paraxial pour une composante spectrale de fréquence  $\omega$ . Comme un faisceau pulsé est constitué d'une somme de composantes spectrales de différentes fréquences, il convient de réécrire l'expression (2.65) sous la forme

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, \omega) = \Psi_0 F(\omega) e^{-ka} \left( \frac{e^{-ik\tilde{R}}}{\tilde{R}} - \frac{e^{ik\tilde{R}}}{\tilde{R}} \right), \quad (2.68)$$

où nous avons ajouté le spectre  $F(\omega)$  qui détermine l'amplitude de chaque composante spectrale en fonction de leur fréquence  $\omega$ .

Un spectre approprié pour modéliser des impulsions ultrabrèves est le spectre de Poisson [31] :

$$F(\omega) = 2\pi e^{-i\phi_0} \left( \frac{s}{\omega_0} \right)^{s+1} \frac{\omega^s e^{-s\omega/\omega_0}}{\Gamma(s+1)} H(\omega), \quad (2.69)$$

où  $\phi_0$  est la phase de l'impulsion,  $\omega_0$  est la fréquence d'amplitude maximale,  $s$  est un paramètre réel et positif,  $\Gamma(\cdot)$  est la fonction gamma et  $H(\cdot)$  est la fonction de Heaviside qui assure l'absence de toute composante de fréquence négative. De plus, puisque  $F(0) = 0$ , le spectre ne contient aucune composante dc. La largeur du spectre  $F(\omega)$  et par conséquent la durée de l'impulsion laser qui lui est associée sont contrôlés par le paramètre  $s$ <sup>13</sup> ; plus  $s$  diminue, plus le spectre s'élargit et plus la durée de l'impulsion diminue. La transformée de Fourier inverse du spectre de Poisson est donnée par la fonction suivante :

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega = e^{-i\phi_0} \left( 1 - \frac{i\omega_0 t}{s} \right)^{-(s+1)}. \quad (2.70)$$

La figure 2.3 illustre les fonctions  $F(\omega)$  et  $f(t)$  pour différentes valeurs de  $s$ .

13. Le paramètre  $s$  peut être interprété physiquement comme un paramètre de durée sans dimension. Cette interprétation deviendra plus claire dans les deux prochaines sections, où il sera montré que dans la limite  $s \gg 1$ , l'enveloppe temporelle obtenue avec le spectre de Poisson tend vers une gaussienne. Dans ce cas, le paramètre  $s$  est relié au paramètre de durée  $T$  de la gaussienne par l'expression  $s \approx \omega_0^2 T^2 / 2$ .

Dans le cas d'une impulsion dite isodiffractante, toutes les composantes spectrales possèdent le même rayon de courbure. Cela implique que le paramètre confocal  $a$  est constant et indépendant de la fréquence [7] ; en régime paraxial, la condition d'isodiffraction implique que chaque composante spectrale possède la même distance de Rayleigh  $z_R$ . Pour une impulsion isodiffractante caractérisée par un spectre en fréquences de Poisson, des solutions analytiques sous forme fermée relativement simples peuvent être obtenues. En effet, en prenant la transformée de Fourier inverse de l'équation (2.68), on obtient une expression spatiotemporelle pour la composante  $z$  du vecteur de Hertz qui va nous permettre de générer l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  ultrabrève et non paraxiale :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_0 F(\omega) e^{-ka} \left( \frac{e^{-ik\tilde{R}}}{\tilde{R}} - \frac{e^{ik\tilde{R}}}{\tilde{R}} \right) e^{i\omega t} d\omega = \frac{\Psi_0}{\tilde{R}} [f(\tilde{t}_-) - f(\tilde{t}_+)] , \quad (2.71)$$

où  $\tilde{t}_{\pm} = t \pm \tilde{R}/c + ia/c$ . On remarque que  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  est composée d'une superposition de deux quantités distinctes, soit un signal qui se propage vers l'axe  $z$  positif,  $f(\tilde{t}_-)$ , et un signal qui se propage vers l'axe  $z$  négatif,  $f(\tilde{t}_+)$ . Nous reviendrons sur cette caractéristique particulière dans la prochaine section.

### 2.3.3 Champ électromagnétique de l'impulsion $\text{TM}_{01}$ exacte

Nous avons maintenant en main tous les outils nécessaires pour obtenir l'expression spatiotemporelle exacte du champ électromagnétique de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$ . En effet, à partir du vecteur de Hertz <sup>14</sup>  $\mathbf{\Pi}_e(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{e}}_z \Psi(\mathbf{r}, t)$ , où la fonction  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  est donnée à l'équation (2.71), on peut calculer les champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  via les relations (2.41). En effectuant les calculs appropriés, on obtient [7, 103] :

$$E_r(\mathbf{r}, t) = \frac{3\Psi_0 \sin \tilde{\theta} \cos \tilde{\theta}}{\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(0)}}{\tilde{R}^2} + \frac{G_+^{(1)}}{c\tilde{R}} + \frac{G_-^{(2)}}{3c^2} \right), \quad (2.72)$$

$$E_z(\mathbf{r}, t) = \frac{\Psi_0}{\tilde{R}} \left[ \frac{(3 \cos^2 \tilde{\theta} - 1)}{\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(0)}}{\tilde{R}} + \frac{G_+^{(1)}}{c} \right) - \frac{\sin^2 \tilde{\theta}}{c^2} G_-^{(2)} \right], \quad (2.73)$$

$$B_\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\Psi_0 \sin \tilde{\theta}}{c\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(1)}}{c\tilde{R}} + \frac{G_+^{(2)}}{c^2} \right), \quad (2.74)$$

où  $\cos \tilde{\theta} = (z + ia)/\tilde{R}$ ,  $\sin \tilde{\theta} = r/\tilde{R}$ ,  $G_{\pm}^{(n)} = f^{(n)}(\tilde{t}_-) \pm f^{(n)}(\tilde{t}_+)$  avec :

$$f^{(n)}(t) = \frac{d^n}{dt^n} f(t) = e^{-i\phi_0} \frac{\Gamma(s+n+1)}{\Gamma(s+1)} \left( \frac{i\omega_0}{s} \right)^n \left( 1 - \frac{i\omega_0 t}{s} \right)^{-(s+n+1)}. \quad (2.75)$$

Encore une fois, l'instant  $t = 0$  correspond au moment où l'impulsion traverse le plan de l'étranglement  $z = 0$ .

Le degré de focalisation de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  exacte est déterminé par le paramètre  $k_0 a$ , où  $k_0 = \omega_0/c$  est le nombre d'onde associé à la fréquence dominante du spectre de Poisson. Sa durée est quant à elle contrôlée par le paramètre de largeur spectrale  $s$ . Contrairement au cas paraxial, il est cependant plus difficile de caractériser l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  exacte car il n'est pas possible d'obtenir une

14. Notons qu'en utilisant un vecteur de Hertz magnétique plutôt qu'électrique, c'est-à-dire  $\mathbf{\Pi}_m(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{e}}_z \Psi(\mathbf{r}, t)$ , il est possible d'obtenir le mode  $\text{TE}_{01}$ . On trouve alors la même structure de champ que pour le mode  $\text{TM}_{01}$ , mais dans laquelle les composantes de  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  sont interchangées par la transformation  $\mathbf{E} \rightarrow c\mathbf{B}$  et  $\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{E}/c$  [5].

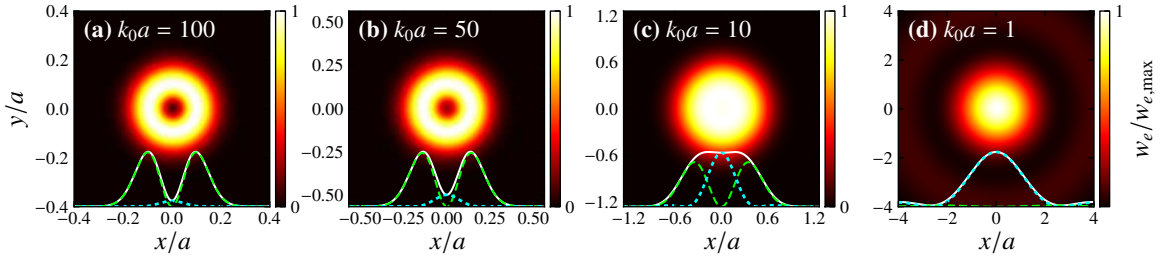


Figure 2.4 – Densité d’énergie électrique dans le plan focal d’une impulsion  $TM_{01}$  non paraxiale sous différentes conditions de focalisation. Pour chaque figure, les courbes vertes représentent  $|E_r|^2$  (pointillé long) et  $|E_z|^2$  (pointillé court) le long de l’axe  $x$  à  $y = 0$  ; la courbe blanche correspond à  $|\mathbf{E}|^2 = |E_r|^2 + |E_z|^2$ . Le paramètre  $s$  vaut 50 dans tous les cas. Le choix de cette valeur de  $s$  est arbitraire ; pour d’autres valeurs, les résultats seraient qualitativement très similaires.

expression analytique qui relie la taille à l’étranglement et la durée de l’impulsion aux paramètres  $s$  et  $k_0a$ . Toutefois, il existe des relations asymptotiquement exactes qui peuvent s’avérer très utiles. Premièrement, il est possible d’estimer la taille du faisceau<sup>15</sup> par l’expression suivante [189] :

$$k_0w_0 \approx \left[ 2k_0a \left( \frac{s}{s + 3/2} \right) \right]^{1/2}, \quad (2.76)$$

qui devient exacte dans la limite  $k_0a \gg 1$ . De plus, lorsque  $k_0a \gg 1$  et  $s \gg 1$ , il est possible de démontrer que les champs donnés aux équations (2.72)–(2.74) tendent vers les champs de l’impulsion  $TM_{01}$  paraxiale avec enveloppe gaussienne, donnés aux équations (2.57)–(2.58) (une démonstration explicite est offerte à la section §4.8). Dans ce cas, il est possible de relier le paramètre  $s$  au paramètre de durée  $T$  de l’enveloppe gaussienne par l’expression

$$T \approx \frac{\sqrt{2s}}{\omega_0}. \quad (2.77)$$

Finalement, aucune expression analytique n’existe pour la puissance transportée par l’impulsion  $TM_{01}$  ; elle doit être calculée en solutionnant numériquement l’intégrale donnée à l’équation (2.59).

Dans des conditions de focalisation modérée, c’est-à-dire lorsque  $k_0a \gg 1$ , l’impulsion  $TM_{01}$  non paraxiale possède un profil de densité d’énergie électrique en forme d’anneau [voir figure 2.4(a)]. Cependant, au fur et à mesure que  $k_0a$  diminue, l’amplitude du champ électrique longitudinal devient de plus en plus importante par rapport à celle du champ électrique radial. Cela transforme significativement le profil de la densité d’énergie électrique ; la région centrale passe progressivement de sombre à lumineuse [voir figure 2.4(b)-(d)]. Cette propriété étonnante de l’impulsion  $TM_{01}$  a déjà été vérifiée en laboratoire [40].

Par ailleurs, comme nous pouvons le remarquer sur les figures 2.5(a)–(c), l’impulsion  $TM_{01}$  non paraxiale est constituée de deux composantes contre-propageantes : une composante principale se propageant vers  $+z$  et une composante de plus faible amplitude se propageant vers  $-z$ . Cette particularité,

15. Il est important de noter que l’équation (2.66) n’est valide que pour la composante de fréquence  $\omega$ . Notons que l’équation (2.66) et l’équation (2.76) tendent vers la même expression lorsque  $k_0a \gg 1$  et  $s \gg 1$ .

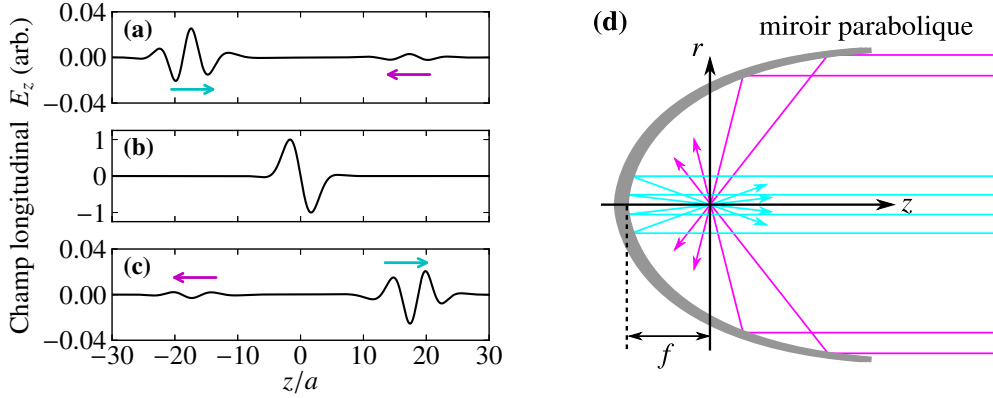


Figure 2.5 – Champ électrique longitudinal  $E_z$  d’une impulsion  $TM_{01}$  ultrabrève et non paraxiale avec  $k_0a = 1$  et  $s = 10$  lorsque (a)  $t < 0$ ; (b)  $t = 0$ ; (c)  $t > 0$ . Notons qu’à plus grande valeur de  $s$ , les deux impulsions contre-propageantes obtenues seraient plus longues. (d) Représentation schématique de la génération de composantes contre-propageantes lors de la focalisation d’un faisceau incident par un miroir parabolique de focale  $f$  qui sous-tend un angle solide supérieur à  $2\pi$ .

qui provient de la superposition d’une source et d’un puits dans la solution à l’équation de Helmholtz, peut être interprétée physiquement à l’aide d’un modèle de focalisation par un miroir parabolique. En effet, il est possible de démontrer mathématiquement que le faisceau  $TM_{01}$  non paraxial peut être produit par la focalisation d’un faisceau radialement polarisé incident sur un miroir parabolique de dimension infinie [9]. Comme la focalisation se fait sur un angle solide de  $4\pi$ , cela donne naissance à deux composantes contre-propageantes [voir figure 2.5(d)]. Notons que l’amplitude de la composante qui se propage vers  $-z$  n’est appréciable que pour  $k_0a < 3$ ; elle diminue très rapidement au fur et à mesure que  $k_0a$  augmente.

### 2.3.4 Limite monochromatique

À la section précédente, nous avons vu que la durée de l’impulsion  $TM_{01}$  est directement reliée au paramètre  $s$  apparaissant dans le spectre de Poisson; plus  $s$  est grand, plus le spectre est étroit et plus l’impulsion est longue. En faisant tendre le paramètre  $s$  vers l’infini, il est possible d’obtenir une description du faisceau  $TM_{01}$  de fréquence  $\omega_0$  en régime continu (régime cw). Comme cette description nous sera utile un peu plus loin dans cette thèse, nous en présentons ici la démonstration.

Afin d’étudier la limite des grandes valeurs de  $s$ , réécrivons d’abord le spectre de Poisson [équation (2.69)] sous la forme suivante :

$$F(\omega) = \frac{2\pi e^{-i\phi_0} s^{s+1}}{\omega_0 \Gamma(s+1)} \exp \left\{ -s \left[ 1 + \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} - \ln \left( 1 + \frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} \right) \right] \right\} H(\omega). \quad (2.78)$$

Lorsque  $s$  est très grand, le spectre est très étroit et on peut approximer que  $|\omega - \omega_0| \ll \omega_0$ . En utilisant le développement en série de Taylor du logarithme,  $\ln(1+x) \approx x - x^2/2$  ( $x \ll 1$ ), ainsi que

l'approximation de Stirling,  $\Gamma(s+1) \approx \sqrt{2\pi s} s^s e^{-s}$  ( $s \gg 1$ ), on obtient :

$$F(\omega) \approx \frac{1}{\omega_0} (2\pi s)^{1/2} e^{-i\phi_0} e^{-\frac{s(\omega-\omega_0)^2}{2\omega_0^2}} \quad (s \gg 1). \quad (2.79)$$

Notons que la fonction de Heaviside  $H(\omega)$  peut être omise considérant que pour un spectre très étroit, la contribution des fréquences négatives est négligeable. Lorsque  $s$  est grand, le spectre de Poisson prend donc une forme gaussienne, dans le domaine spectral comme dans le domaine temporel <sup>16</sup>.

Dans la limite monochromatique, c'est-à-dire en prenant la limite  $s \rightarrow \infty$  de l'équation (2.79), le spectre de Poisson se réduit à une fonction delta de Dirac :

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \frac{1}{\omega_0} (2\pi s)^{1/2} e^{-i\phi_0} e^{-\frac{s(\omega-\omega_0)^2}{2\omega_0^2}} = 2\pi e^{-i\phi_0} \delta(\omega - \omega_0). \quad (2.80)$$

Dans le domaine temporel, nous avons donc :

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} 2\pi e^{-i\phi_0} \delta(\omega - \omega_0) e^{i\omega t} d\omega = e^{i(\omega_0 t - \phi_0)}. \quad (2.81)$$

Afin d'obtenir le faisceau  $\text{TM}_{01}$  monochromatique de fréquence  $\omega_0$ , il suffit d'insérer la fonction  $f(t)$  donnée à l'équation précédente dans les expressions (2.72)–(2.74). On a d'abord :

$$G_+^{(n)} = 2(i\omega_0)^n e^{-k_0 a} \cos(k_0 \tilde{R}) e^{i(\omega_0 t - \phi_0)}, \quad (2.82)$$

$$G_-^{(n)} = 2i(i\omega_0)^n e^{-k_0 a} \sin(k_0 \tilde{R}) e^{i(\omega_0 t - \phi_0)}. \quad (2.83)$$

Après quelques manipulations algébriques, on obtient alors [5, 107] :

$$E_r(\mathbf{r}, t) = -2ik_0^3 \Psi_0 e^{-k_0 a} \sin \tilde{\theta} \cos \tilde{\theta} j_2(k_0 \tilde{R}) e^{i(\omega_0 t - \phi_0)}, \quad (2.84)$$

$$E_z(\mathbf{r}, t) = -\frac{4}{3} ik_0^3 \Psi_0 e^{-k_0 a} \left[ j_0(k_0 \tilde{R}) + P_2(\cos \tilde{\theta}) j_2(k_0 \tilde{R}) \right] e^{i(\omega_0 t - \phi_0)}, \quad (2.85)$$

$$B_\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{2}{c} k_0^3 \Psi_0 e^{-k_0 a} \sin \tilde{\theta} j_1(k_0 \tilde{R}) e^{i(\omega_0 t - \phi_0)}, \quad (2.86)$$

où les fonctions de Bessel sphériques de première espèce, dénotées  $j_n(x)$ , valent

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad j_2(x) = \frac{3 \sin x}{x^3} - \frac{3 \cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}, \quad (2.87)$$

et  $P_2(x) = (3 \cos^2 x - 1)/2$  est le polynôme de Legendre de degré 2.

Dans le cas monochromatique, la puissance transportée dans la direction  $z$  par le faisceau  $\text{TM}_{01}$  peut être calculée analytiquement [6] :

$$P = \frac{\pi k_0 e^{-2k_0 a} |\Psi_0|^2}{2\eta_0 a^3} \left[ 2k_0 a \sinh(2k_0 a) - \cosh(2k_0 a) + 1 - 2k_0^2 a^2 \right] \quad (2.88)$$

Comme le terme entre crochets tend vers  $k_0 a e^{2k_0 a}$  lorsque  $k_0 a \gg 1$ , on retrouve le résultat donné à l'équation (2.59) dans la limite paraxiale.

16. La transformée de Fourier inverse d'une gaussienne dans le domaine spectral correspond à une gaussienne dans le domaine temporel.

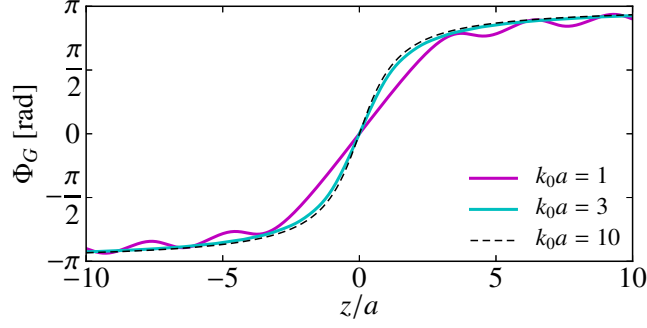


Figure 2.6 – Déphasage de Gouy du faisceau  $TM_{01}$  non paraxial pour différentes valeurs de  $k_0a$ .

Par ailleurs, bien que cela n'ait jamais été relevé dans la littérature, il est possible d'obtenir une expression analytique pour le déphasage de Gouy du faisceau  $TM_{01}$  non paraxial. En exprimant le champ  $E_z$  sous forme polaire, on trouve que le déphasage supplémentaire accumulé sur l'axe optique ( $r = 0$ ) vaut :

$$\Phi_G = 3 \arctan\left(\frac{z}{a}\right) - \arctan\left\{\frac{k_0z + e^{-2k_0a}[k_0z \cos(2k_0z) - (k_0a + 1) \sin(2k_0z)]}{(k_0a - 1) + e^{-2k_0a}[k_0z \sin(2k_0z) + (k_0a + 1) \cos(2k_0z)]}\right\} \quad (2.89)$$

Notons que les termes multipliés par  $e^{-2k_0a}$ , qui sont dûs à la composante contre-propageante du faisceau et causent des oscillations dans la phase de Gouy (voir figure 2.6), peuvent être négligés dès que  $k_0a \gtrsim 3$  :

$$\Phi_G \approx 3 \arctan\left(\frac{z}{a}\right) - \arctan\left[\frac{z}{a} \left(\frac{1}{1 - 1/k_0a}\right)\right]. \quad (2.90)$$

On voit que cette dernière expression tend correctement vers le résultat paraxial  $\Phi_G = 2 \arctan(z/a)$  lorsque  $k_0a \gg 1$ . Finalement, dans le cas où la contribution de l'onde contre-propageante peut être négligée, la vitesse de phase axiale du faisceau  $TM_{01}$  non paraxial peut être calculée aisément<sup>17</sup> :

$$v_{ph} = c \left\{ 1 - \frac{3}{k_0a[1 + (z/a)^2]} + \frac{k_0a - 1}{(k_0a - 1)^2 + k_0^2 z^2} \right\}^{-1}. \quad (2.91)$$

En résumé, à l'aide des outils présentés à la section §2.3, nous avons vu qu'il est possible d'obtenir des solutions rigoureuses sous forme fermée aux équations de Maxwell pour une impulsion laser de mode  $TM_{01}$ . Nous sommes maintenant en mesure d'étudier l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  dans le régime des impulsions ultrabrèves et fortement focalisées.

## 2.4 Théorie de l'accélération d'électrons par impulsions $TM_{01}$

Avant d'aborder l'analyse de l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  de manière quantitative, il est intéressant de se pencher sur la dynamique d'un point de vue un peu plus qualitatif. Cela assurera une bonne compréhension du mécanisme d'accélération.

17. Dans le cas général, le résultat est beaucoup plus compliqué, quoique direct à obtenir.



### 2.4.1 Équations du mouvement

Pour un électron libre soumis au champ électromagnétique d'une impulsion  $TM_{01}$ , les équations du mouvement peuvent s'écrire de la manière suivante, en coordonnées cylindriques  $(r, \phi, z)$  :

$$\frac{dr}{dt} = v_r, \quad \frac{d\phi}{dt} = \frac{v_\phi}{r}, \quad \frac{dz}{dt} = v_z, \quad (2.92)$$

$$\frac{dv_r}{dt} = -\frac{e}{\gamma m_e} \left[ \left(1 - \frac{v_r^2}{c^2}\right) E_r - \frac{v_r v_z}{c^2} E_z - v_z B_\phi \right], \quad (2.93)$$

$$\frac{dv_\phi}{dt} = \frac{e}{\gamma m_e} \left( \frac{v_r v_\phi}{c^2} E_r + \frac{v_z v_\phi}{c^2} E_z \right), \quad (2.94)$$

$$\frac{dv_z}{dt} = -\frac{e}{\gamma m_e} \left[ \left(1 - \frac{v_z^2}{c^2}\right) E_z - \frac{v_r v_z}{c^2} E_r + v_r B_\phi \right]. \quad (2.95)$$

D'après ces équations, on peut voir que la trajectoire d'un électron initialement au repos dans le plan défini par  $\phi = \phi_{ini}$  demeurera confinée dans ce même plan à tout moment ultérieur. De plus, pour un électron initialement au repos et localisé sur l'axe optique ( $r = 0$ ), la dynamique d'accélération se réduit à une dimension spatiale et est gouvernée par les équations suivantes :

$$\frac{dz}{dt} = v_z, \quad \frac{dv_z}{dt} = -\frac{eE_z}{\gamma^3 m_e}. \quad (2.96)$$

D'après l'équation (2.96), un électron initialement au repos sur l'axe optique qui est soumis à un faible champ électrique harmonique oscillera à la vitesse :

$$\frac{|v_z|}{c} \approx \frac{e|E_z|}{m_e c \omega_0}, \quad (2.97)$$

où  $\omega_0$  et  $|E_z|$  sont respectivement est la fréquence et l'amplitude du champ électrique. La forme de cette dernière équation suggère la définition d'un paramètre sans dimension qui permet de caractériser l'intensité du champ électromagnétique et ainsi que les différents régimes dynamiques de l'interaction d'une impulsion  $TM_{01}$  avec un électron [65] :

$$a_z^2 \equiv \left( \frac{e}{m_e c \omega_0} \right)^2 |E_z|_{\max}^2. \quad (2.98)$$

En fonction de la valeur de  $a_z$  par rapport à 1, on distingue généralement trois régimes<sup>18</sup> :

$$\text{Régime non relativiste : } a_z^2 \ll 1$$

$$\text{Régime relativiste : } a_z^2 \sim 1$$

$$\text{Régime ultra-relativiste : } a_z^2 \gg 1.$$

Considérons un électron initialement au repos sur l'axe optique à l'extérieur de l'impulsion laser. Au fur et à mesure que l'impulsion s'en approche, l'électron commence à osciller parallèlement à l'axe  $z$ , sous l'influence des premiers cycles du champ électrique longitudinal. En fonction de la puissance de l'impulsion, différents scénarios peuvent se produire (voir figure 2.7).

18. Quelques détails supplémentaires sur les trois régimes d'accélération seront donnés à la section §4.11

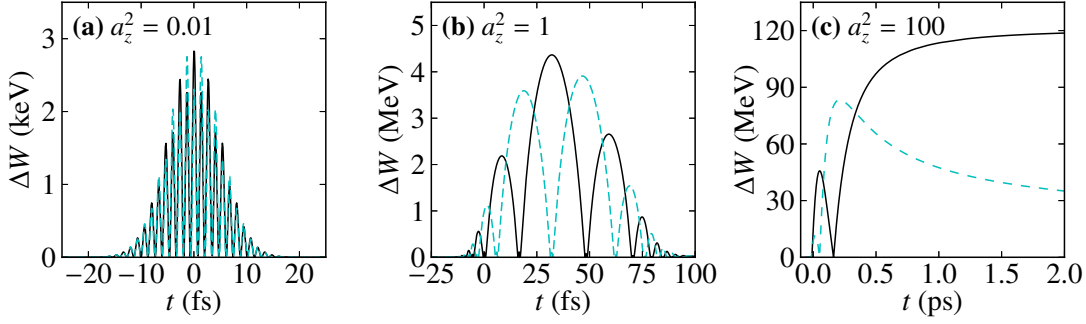


Figure 2.7 – Illustration des trois différents régimes d’accélération. (a) Dans le régime non relativiste ( $a_z^2 = 0.01$ ,  $P = 2.1 \times 10^{11}$  W), l’électron glisse d’un cycle à l’autre dans l’impulsion et ne subit aucun gain net en énergie. (b) Dans le régime relativiste ( $a_z^2 = 1$ ,  $P = 2.1 \times 10^{13}$  W), l’accélération sous-cycle commence à se produire. L’électron passe davantage de temps dans les demi-cycles de polarité négative mais le gain en énergie demeure assez modeste au final. (c) Dans le régime ultra-relativiste ( $a_z^2 = 100$ ,  $P = 2.1 \times 10^{15}$  W), l’électron parvient à rester synchronisé avec le champ sur une grande distance, ce qui mène à un gain en énergie appréciable. Les trajectoires ont été calculées avec le champ paraxial avec enveloppe gaussienne pour  $\lambda_0 = 800$  nm,  $w_0 = 3$   $\mu$ m,  $T = 10$  fs,  $\phi_0 = 0$  (ligne continue) et  $\pi$  (ligne pointillée).

En régime non relativiste, la vitesse d’oscillation de l’électron est très faible en comparaison avec la vitesse de la lumière tout au long de l’interaction. Dans ce régime, la dynamique de l’électron peut généralement être décrite par la force pondéromotrice<sup>19</sup>. L’électron glissera simplement d’un cycle optique à l’autre dans le champ électrique longitudinal [voir figure 2.7(a)]. À sa sortie de l’impulsion, l’électron n’aura gagné en moyenne qu’une énergie négligeable.

Pour une valeur de la puissance de plus en plus grande, l’électron atteint des vitesses de plus en plus élevées lors de ses oscillations [voir figure 2.7(b)]. Éventuellement, si l’amplitude du champ électrique longitudinal devient suffisamment grande, l’électron peut être rapidement accéléré à une vitesse comparable à celle de la lumière. Dans ce cas, il peut demeurer en phase avec le même cycle de champ électrique sur une distance appréciable, et ainsi acquérir une grande énergie [voir figure 2.7(c)]. On appelle ce mécanisme *accélération sous-cycle*.

## 2.4.2 Accélération sous-cycle

Lorsque l’électron atteint dans sa trajectoire un endroit où le champ électrique longitudinal est capable de l’accélérer à une vitesse relativiste à l’intérieur d’un demi-cycle optique, il se produit une accélération sous-cycle. Ce phénomène se produit généralement près du plan de l’étranglement étant

<sup>19</sup>. La force pondéromotrice permet de décrire le mouvement moyen d’une particule chargée dans un champ électromagnétique oscillant à la fréquence  $\omega_0$  [78, 79] :

$$\frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = -\frac{e^2}{4m_e^2 \omega_0^2} \nabla |\mathbf{E}|^2,$$

où  $\langle \dots \rangle$  indique une moyenne temporelle sur les oscillations à fréquence  $\omega_0$ . Notons que la force pondéromotrice est indépendante de la phase et de la polarisation du laser.

donné que  $E_z$  y atteint son amplitude maximale. On définit habituellement la puissance seuil pour l'accélération sous-cycle comme étant la puissance pour laquelle  $a_z^2 = 1$  [175, 180, 186]. Dans le cas paraxial, on obtient :

$$P_{\text{seuil}} = \frac{\pi m_e^2 c^4}{8\eta_0 e^2} (k_0 z_R)^2. \quad (2.99)$$

Selon cette expression, plus la focalisation est forte, plus la puissance seuil pour l'accélération sous-cycle est faible.

Même si l'électron est accéléré rapidement jusqu'à une vitesse relativiste, il n'est pas garanti qu'il puisse rester en phase indéfiniment avec le même demi-cycle de champ électrique. En effet, la vitesse de phase d'un faisceau laser qui se propage dans le vide est supérieure à la vitesse de la lumière – une conséquence du déphasage de Gouy. Ceci peut donc faire en sorte que l'électron glisse dans le demi-cycle suivant (de polarité opposée) et perde par le fait même l'énergie acquise.

Dans le cas d'un faisceau  $\text{TM}_{01}$  paraxial, la distance sur laquelle un électron relativiste ( $v_z \approx c$ ) glisse d'un demi-cycle dans le champ électrique axial peut être estimée par :

$$\Delta z_{\text{dph}} = \frac{\lambda_0}{2} \left( \frac{c}{v_{\text{ph}} - c} \right) = \frac{\lambda_0}{2} \left[ \frac{k_0 z_R}{2} \left( 1 + \frac{z^2}{z_R^2} \right) - 1 \right], \quad (2.100)$$

où l'équation (2.63) a été utilisée pour la vitesse de phase du faisceau  $\text{TM}_{01}$  paraxial. Cette distance est minimale près de l'étranglement, là où la phase du faisceau évolue le plus rapidement ; dans ce cas, on a  $\Delta z_{\text{dph}} \approx \pi z_R / 2$ . Par conséquent, un électron accéléré à une vitesse relativiste au voisinage du plan focal ne peut rester synchronisé avec l'impulsion laser que sur une distance de l'ordre de la distance de Rayleigh, après quoi il glisse d'un demi-cycle optique dans le champ et est décéléré. Toutefois, une fois expulsé de la région de l'étranglement ( $z > z_R$ ), il peut entrer dans un autre demi-cycle accélérateur. Comme le déphasage de Gouy évolue beaucoup plus lentement de  $z = z_R$  à  $z \rightarrow \infty$ , l'électron peut demeurer synchronisé avec le même demi-cycle de champ et subir une accélération soutenue sur une grande distance (on a  $\Delta z_{\text{dph}} \approx \pi z^2 / 2z_R$  lorsque  $z \gg z_R$ ), pourvu bien sûr que l'amplitude du champ soit encore suffisante pour l'accélérer rapidement à une vitesse relativiste. Loin du plan focal, l'amplitude du champ décroît comme  $1/z^2$ , et l'électron peut ainsi retrouver sa liberté sans avoir perdu l'énergie extraite de l'impulsion.

Lorsqu'il y a accélération sous-cycle, le gain en énergie net  $\Delta W$  de l'électron dépend fortement de sa position initiale sur l'axe et de la phase  $\phi_0$  de l'impulsion laser. En effet, ces deux paramètres déterminent à quelle position l'électron peut entrer dans son dernier demi-cycle accélérateur et par conséquent la quantité d'énergie qu'il peut extraire du champ électrique. En supposant le cas idéal d'un électron qui serait injecté à la vitesse de la lumière au sommet de l'impulsion et serait synchronisé avec celui-ci de  $z = 0$  à  $z \rightarrow \infty$ , on peut calculer une limite supérieure au gain en énergie dans une impulsion  $\text{TM}_{01}$  [48, 186] :

$$\Delta W_{\text{lim}} = \int_0^\infty \mathbf{F}_L \cdot \hat{\mathbf{e}}_z dz = \text{Re} \left\{ e \int_0^\infty \frac{2ik_0 \Psi_0}{(z + iz_R)^2} dz \right\} = e \left( \frac{8\eta_0 P}{\pi} \right)^{1/2}. \quad (2.101)$$

On remarquera que cette quantité ne dépend que de la puissance de l'impulsion.

En résumé, nous avons présenté dans cette section une description assez qualitative du mécanisme physique gouvernant l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$ . Afin d'étudier le phénomène de manière plus quantitative, il est nécessaire de simuler numériquement la dynamique d'accélération. C'est à la description de ces simulations qu'est consacré le chapitre suivant.

## Chapitre 3

# Notions préliminaires, partie II : simulations numériques

Au chapitre précédent, nous avons présenté les outils théoriques nécessaires à la modélisation de l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  ultrabrèves et fortement focalisées. Afin d'effectuer l'analyse du schéma d'accélération, il convient maintenant de solutionner numériquement les équations qui en régissent le fonctionnement. Ce chapitre est consacré à la présentation des deux types de simulations numériques qui ont été réalisées dans nos travaux.

La section §3.1 décrit d'abord brièvement les simulations à un électron, dites simulations de type *particule test*. Par la suite, la section §3.2, qui constitue la majeure partie de ce chapitre, présente de manière détaillée le fonctionnement des simulations de type *particle-in-cell* qui ont été réalisées avec le logiciel libre Epoch.

### 3.1 Simulations à un électron

L'approche la plus simple pour analyser l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  est la réalisation de simulations de type particule test [21]. Plus précisément, cela consiste à analyser l'effet de l'impulsion laser sur un électron isolé, appelé charge test, via la force de Lorentz. De manière implicite, cela revient à approximer que tous les autres processus qui pourraient influencer le schéma d'accélération (par exemple l'ionisation, les effets de plasma et de charge d'espace, etc.) sont négligeables. Nous reviendrons sur ces effets à la section suivante.

Pour solutionner la dynamique d'une charge test dans le champ électromagnétique de l'impulsion  $TM_{01}$ , le système d'équations différentielles ordinaires (2.92)–(2.95) est intégré numériquement. Pour des électrons initialement au repos, il est suffisant, comme nous l'avons vu à la section §2.4.1, de simuler la dynamique avec un maximum de deux dimensions spatiales, soit  $z$  et  $r$ . Afin de s'assurer que l'électron est initialement à l'extérieur de l'impulsion laser, un délai temporel est ajouté dans

l'expression mathématique de l'impulsion <sup>1</sup>. Par convention, le temps  $t = 0$  correspond à l'instant où le sommet de l'impulsion laser atteint le plan de l'étranglement situé à  $z = 0$ . L'intégration numérique est poursuivie jusqu'à la fin de l'interaction entre l'impulsion laser et l'électron, c'est-à-dire jusqu'à ce que le mouvement de la particule devienne uniforme et que son énergie se stabilise.

D'un point de vue technique, un intégrateur numérique de type Runge-Kutta-Fehlberg est utilisé pour solutionner les équations du mouvement [131]. La méthode Runge-Kutta-Fehlberg est un algorithme de la famille des méthodes Runge-Kutta qui utilise six évaluations de fonction afin de calculer la solution du système d'équations différentielles ordinaires à l'ordre  $O(\Delta^5)$  et à l'ordre  $O(\Delta^6)$ , où  $\Delta$  est le pas d'intégration. La différence entre ces deux solutions est interprétée comme l'erreur locale <sup>2</sup> commise sur la solution à l'ordre  $O(\Delta^5)$ , et la grandeur de cette erreur est contrôlée via l'utilisation d'un pas d'intégration adaptatif. La méthode Runge-Kutta-Fehlberg permet par conséquent d'obtenir une solution numérique avec une erreur globale à l'ordre  $O(\Delta^4)$ . Pour obtenir les résultats présentés dans cette thèse, l'implémentation C++ de l'intégrateur Runge-Kutta-Fehlberg appartenant à la librairie de calcul scientifique GSL a été utilisée [52].

## 3.2 Simulations particle-in-cell

Tel que mentionné à la section précédente, l'approche par particule test consiste à modéliser l'accélération d'électrons sous l'hypothèse que chaque électron est isolé et n'interagit qu'avec l'impulsion laser. Cette hypothèse, qui simplifie considérablement les simulations numériques, revient à négliger tout autre processus physique susceptible d'affecter l'interaction : mécanismes d'ionisation, effets de plasma, répulsion électrostatique entre les électrons, etc. En réalité, ces processus peuvent influencer la dynamique d'accélération. L'ionisation détermine à quel moment l'électron est libéré dans le champ électromagnétique de l'impulsion laser, une séparation de charges dans le plasma peut créer un champ accélérateur appréciable, la répulsion électrostatique entre les électrons peut entraîner un étalement spatial de l'impulsion d'électrons, etc.

L'approche particle-in-cell (PIC) est une méthode numérique à la fine pointe qui permet de modéliser la propagation d'ondes électromagnétiques en présence de charges libres. Elle permet ainsi de modéliser un schéma d'accélération par laser en tenant compte des effets collectifs qui naissent de l'interaction laser-plasma. Afin d'amener nos travaux à un niveau de réalisme supérieur, nous avons réalisé pour cette thèse des simulations PIC à trois dimensions de la dynamique d'accélération. Ces simulations ont été effectuées à l'aide du code PIC relativiste Epoch, dont la source est publique.

Cette thèse marque la première fois où des simulations PIC ont été réalisées au sein du groupe du Prof. Michel Piché à l'Université Laval. Par conséquent, un soin particulier a été apporté à effectuer une description détaillée de leur fonctionnement dans un souci de pérennité. Ce choix est également

---

1. Un délai correspondant à environ 5 fois la durée de l'impulsion est habituellement suffisant.

2. L'*erreur locale* est l'erreur commise à chaque pas d'intégration par l'intégrateur numérique, tandis que l'*erreur globale* est l'erreur totale commise sur une trajectoire numérique [125].

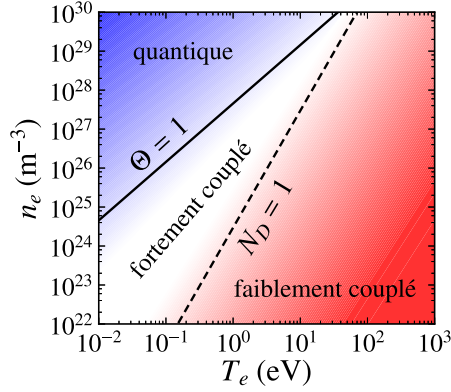


Figure 3.1 – Illustration des trois régimes de la physique des plasmas dans le plan  $(T_e, n_e)$ . La droite  $\Theta = 1$  marque la séparation entre le régime quantique et le régime classique, tandis que la droite  $N_D = 1$  sépare le cas classique en régime fortement couplé et régime faiblement couplé. Figure inspirée de [176].

motivé par le fait que nous avons été confrontés à un certain manque de documentation claire et complète à propos de la méthode PIC dans la littérature. Bien que cette section puisse paraître un peu lourde aux premiers abords, elle devrait permettre au lecteur de développer une bonne compréhension du fonctionnement interne du code Epoch et incidemment des codes PIC en général.

### 3.2.1 Mise en contexte : théorie de l'interaction rayonnement-matière

Un plasma est un état ionisé de la matière constitué d'un ensemble de charges négatives (électrons), de charges positives (ions) et d'éléments neutres. Bien que les charges ne soient pas liées, elles s'influencent mutuellement par le biais du champ électromagnétique qu'elles génèrent. Ces interactions complexes peuvent donner naissance à des phénomènes collectifs d'une grande richesse. C'est à ces phénomènes que s'intéresse la physique des plasmas.

Afin de mettre la méthode PIC en contexte, il convient de passer brièvement en revue les différents régimes rencontrés en physique des plasmas : les plasmas à faible couplage, les plasmas à fort couplage, et les plasmas quantiques [176] (voir figure 3.1). Afin de caractériser le degré de couplage d'un plasma, on doit évaluer le paramètre de dégénérescence

$$\Theta = \frac{k_B T_e}{E_F} = \frac{2m_e k_B T_e}{\hbar^2 (3\pi^2 n_e)^{2/3}}, \quad (3.1)$$

ainsi que le nombre de Debye

$$N_D = \frac{4\pi}{3} n_e \lambda_D^3 = \frac{4\pi}{3} \frac{(\epsilon_0 k_B T_e)^{3/2}}{n_e^{1/2} e^3}, \quad (3.2)$$

où  $E_F = \hbar^2 (3\pi^2 n_e)^{2/3} / 2m_e$  est l'énergie de Fermi,  $\lambda_D = (\epsilon_0 k_B T_e / n_e e^2)^{1/2}$  est la longueur de Debye,  $n_e$  est la densité électronique,  $T_e$  est la température électronique (qui est une mesure de l'énergie des électrons),  $\hbar$  est la constante de Planck et  $k_B$  est la constante de Boltzmann.

Du point de vue physique, le paramètre  $\Theta$  quantifie l'influence de la pression interne du plasma due au principe d'exclusion de Pauli. Dans un plasma froid et dense où  $\Theta \lesssim 1$ , les électrons tendent à occuper les niveaux de plus faible énergie. Par conséquent, la dynamique du plasma peut être significativement influencée par les effets de blocage et d'écran quantiques résultant du fait que deux fermions ne peuvent occuper le même état. On est alors en régime *quantique*.

À l'opposé, lorsque  $\Theta \gg 1$ , les effets dus au principe d'exclusion de Pauli deviennent négligeables et le plasma peut être décrit classiquement. Dans le cas classique, la longueur de Debye  $\lambda_D$  joue le rôle de paramètre d'écran ; elle représente physiquement la distance sur laquelle les électrons écrantent le champ électrique. Le paramètre  $N_D$ , qui correspond au nombre d'électrons dans la sphère de Debye, permet de distinguer deux régimes de couplage. Lorsque  $N_D \gg 1$ , le plasma est très chaud et peu dense ; les microfluctuations du champ électromagnétique ainsi que les collisions jouent un rôle négligeable et le plasma peut être représenté en champ moyen par une fonction de densité. Il s'agit du régime *faiblement couplé*. À l'inverse, lorsque  $N_D \lesssim 1$ , le plasma est chaud et dense ; les collisions et les fluctuations du champ jouent un rôle important dans la dynamique et le plasma doit idéalement être décrit au niveau microscopique comme un système à  $N$  corps. Il s'agit du régime *fortement couplé*.

Une description semi-classique exacte de l'interaction rayonnement-matière peut être obtenue en solutionnant de manière consistante l'équation de von Neumann [143] [figure 3.2(a)],

$$\frac{\partial \hat{\rho}^{(N)}}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}^{(N)}], \quad (3.3)$$

couplée aux équations classiques de Maxwell pour le champ électromagnétique. L'équation de von Neumann décrit l'évolution temporelle de la matrice de densité, notée  $\hat{\rho}^{(N)}$ , d'un système quantique à  $N$  particules caractérisé par l'Hamiltonien  $\hat{H}$ . Solutionner les équations de von Neumann-Maxwell représente toutefois une tâche colossale. Par conséquent, on utilise généralement divers niveaux d'approximation. La hiérarchie de ces approximations est schématisée à la figure 3.2.

Dans la limite classique, lorsque  $\Theta \gg 1$ , la dynamique du plasma peut être décrite par l'équation de Liouville [figure 3.2(b)], qui est l'équivalent classique de l'équation de von Neumann [143] :

$$\frac{\partial \rho^{(N)}}{\partial t} = \{H, \rho^{(N)}\}, \quad (3.4)$$

où  $\rho^{(N)} = \rho^{(N)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t)$  est la densité de probabilité à  $N$  particules du système classique gouverné par l'Hamiltonien  $H$ . La solution de l'équation de Liouville revient à solutionner les  $6N$  équations du mouvement couplées du système de  $N$  particules.

Au prix de perdre les caractéristiques microscopiques du système, une description plus simple de la dynamique du plasma peut être obtenue en intégrant  $\rho^{(N)}$  sur  $6(N - 1)$  dimensions. Le système est alors décrit par la fonction de densité à une particule  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ , qui correspond à l'ordre le plus bas de la hiérarchie Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY) [143]. Sous cette approximation, on passe de l'équation de Liouville à l'équation de Boltzmann [figure 3.2(c)], qui s'exprime en  $6 + 1$



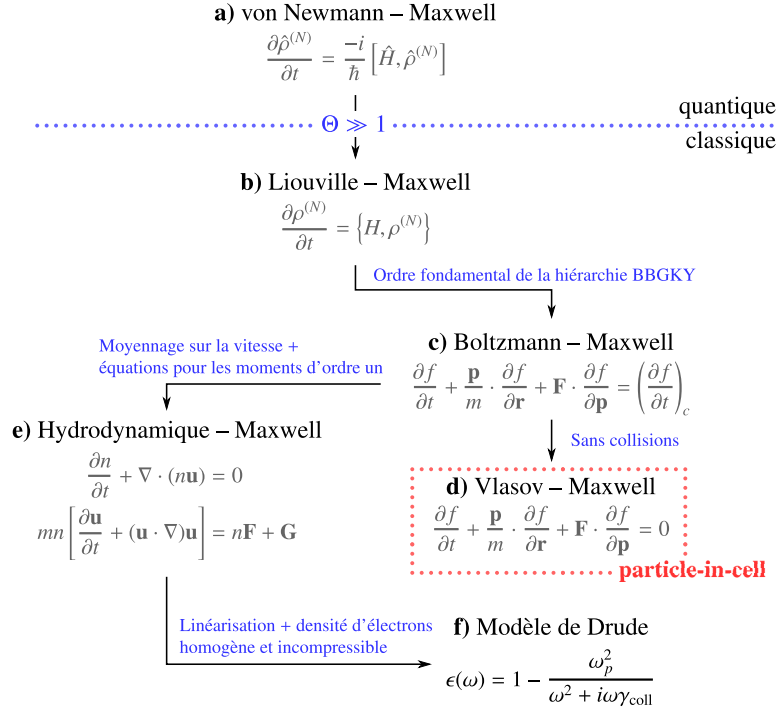


Figure 3.2 – Illustration schématique des différents niveaux d’approximation intervenant dans la description de la dynamique laser-plasma. La méthode *particle-in-cell* (PIC) vise à solutionner numériquement les équations de Vlasov-Maxwell. Notons que certains codes PIC, dits codes PIC collisionnels, permettent également de modéliser les collisions entre les particules, ce qui permet de solutionner les équations de Boltzmann-Maxwell (3.5). Figure inspirée de [176].

dimensions :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_c, \quad (3.5)$$

où le terme de droite tient compte des collisions à deux corps. Lorsque les collisions peuvent être négligées,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (3.6)$$

Cette dernière équation est dite équation de Vlasov [figure 3.2(d)], et c’est à ce niveau que s’insèrent les simulations PIC.

Les équations de Boltzmann-Maxwell peuvent être simplifiées davantage en intégrant sur la variable  $\mathbf{p}$  et en obtenant les équations pour les moments. Le système est alors décrit par la densité  $n(\mathbf{r}, t)$  et le champ de vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ , dont l’évolution temporelle est gouvernée par les équations de Navier-Stokes en 3+1 dimensions [figure 3.2(e)]. Dans cette limite hydrodynamique de la description du plasma, la distribution en vitesse à tout point de l’espace est remplacée par une vitesse moyenne locale. Les collisions peuvent être prises en compte dans le modèle en introduisant un taux de collisions phénoménologique  $\gamma_{\text{coll}}$ .

Finalement, on peut obtenir un dernier niveau d'approximation en supposant que le fluide est homogène ( $\nabla n = 0$ ) et incompressible ( $\nabla \times \mathbf{u} = 0$  et  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ ). Sous l'action d'un faible champ électrique de fréquence  $\omega$  et en supposant que toutes les quantités physiques oscillent également à cette fréquence (linéarisation du système), on obtient l'expression suivante de la permittivité du milieu [figure 3.2(f)] :

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma_{\text{coll}}}, \quad (3.7)$$

où  $\omega_p^2 = n_e e^2 / \epsilon_0 m_e$  est la fréquence de plasma. Cette expression correspond à celle issue du célèbre modèle de Drude qui vise à expliquer la conductivité dans les matériaux.

### 3.2.2 La méthode particle-in-cell

La dynamique d'un plasma est déterminée par la relation d'auto-cohérence qui existe entre le champ électromagnétique et les charges en mouvement. En principe, on peut voir l'évolution d'un plasma de la manière suivante :

1. la présence de charges libres en mouvement génère un champ électromagnétique, qui peut être calculé en solutionnant les équations de Maxwell ;
2. le champ électromagnétique exerce une force sur les charges libres et influence leur mouvement via la loi de force de Lorentz.

Cette vision circulaire de la dynamique d'un plasma est au coeur de la méthode PIC.

Nous avons vu à la section précédente que sous certaines approximations, la dynamique d'un plasma peut être décrite par l'équation de Vlasov (3.6). Cette dernière peut être réécrite de la manière suivante :

$$\frac{df_\alpha}{dt} = 0, \quad (3.8)$$

où l'indice  $\alpha$  a été ajouté pour dénoter l'espèce de particule que décrit la fonction de distribution (électrons, protons, différents types d'ions). Il est ainsi clair qu'une section infinitésimale de la fonction de distribution  $f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  demeure constante le long d'une trajectoire  $(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$  dans l'espace des phases. Cette trajectoire est dite une caractéristique de l'équation (3.8). La famille formée par toutes ces caractéristiques définit une hypersurface dans l'espace  $(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  sur laquelle la fonction de distribution  $f_\alpha$  est solution à l'équation de Vlasov.

La méthode PIC consiste en une procédure algorithmique qui permet d'obtenir un certain nombre de caractéristiques à l'équation (3.8). Le code simule la trajectoire d'un nombre fini de marqueurs, où chaque marqueur est associé à une partie de la fonction de distribution  $f_\alpha$ . Physiquement, un marqueur peut représenter une ou plusieurs particules, et possède ainsi une masse et une charge. Puisque le rapport charge sur masse demeure identique pour 1 ou  $N$  particules de même espèce  $\alpha$ , les marqueurs se déplacent dans le champ électromagnétique comme le feraient des particules de l'espèce qu'ils représentent.

Possédant généralement une charge nette différente de zéro, les marqueurs en mouvement génèrent des courants, qui à leur tour contribuent à l'établissement d'un champ électromagnétique susceptible d'affecter les autres marqueurs. Afin de bien résoudre cette dynamique, les codes de type PIC doivent solutionner cette relation d'auto-cohérence. Tandis que les trajectoires sont déterminées par l'équation de Vlasov, le champ électromagnétique est quant à lui déterminé par les équations de Maxwell microscopiques (2.1)–(2.4). Le terme de courant  $\mathbf{J}$  assure le couplage entre les marqueurs et le champ électromagnétique :

$$\mathbf{J} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} \mathbf{v} d^3p . \quad (3.9)$$

Dans un code PIC, le champ électromagnétique est évalué sur une grille qui discrétise l'espace, tandis que les marqueurs se déplacent dans un espace continu. Lorsque vient le temps de calculer la force exercée sur les marqueurs, les champs sont interpolés à la position de ces derniers. Inversement, lorsque les courants doivent être calculés pour solutionner les équations de Maxwell, une procédure spéciale s'occupe de projeter les marqueurs sur la grille. Ces courants sont responsables de l'établissement des interactions à longue portée entre les charges. Finalement, l'évolution temporelle s'effectue par une discrétisation du temps en petits intervalles de durée  $\Delta t$ ,

### 3.2.3 Le code Epoch

Le code Epoch (Extendable PIC Open Collaboration Project<sup>3</sup>) est un code PIC relativiste disponible sous licence publique générale GNU (GPL). En d'autres mots, il s'agit d'un logiciel libre dont l'accès à la source est public. Le code est développé par le Collaborative Computational Plasma Physics Consortium<sup>4</sup>, un consortium supporté par une trentaine de chercheurs de renommée mondiale<sup>5</sup>.

Le code Epoch, écrit en Fortran 95 standard, permet d'effectuer des simulations PIC en une, deux et trois dimensions cartésiennes. L'intégration numérique des équations de Maxwell et des équations du mouvement pour les marqueurs constituant le plasma est assurée par des algorithmes de type FDTD (voir section §3.3.1) et *leap-frog* (voir section §3.4.1), qui sont tous deux précis au deuxième ordre (espace et temps). Le code Epoch est entièrement parallélisé à l'aide de MPI 1.2 (Message Passing Interface) en utilisant une stratégie de décomposition en sous-domaines spatiaux. Par ailleurs, Epoch possède son propre type de fichier de sauvegarde binaire et compressé, et possède sa propre routine interne de redémarrage à partir d'une sauvegarde (*checkpointing*).

Pour les travaux présentés dans cette thèse, la version 3D du code Epoch a été utilisée. Bien que le problème auquel nous nous intéressons présente *a priori* une symétrie de révolution, la décision d'utiliser la version 3D a été motivée par les raisons suivantes : (i) afin de faire des simulations en deux dimensions, il aurait fallu coder entièrement une version 2D-cylindrique du programme ; (ii) initialement, il

3. <http://ccpforge.cse.rl.ac.uk/gf/project/epoch/>

4. <http://www.ccpp.ac.uk/projects/index.html>

5. <http://www.ccpp.ac.uk/members/index.html>

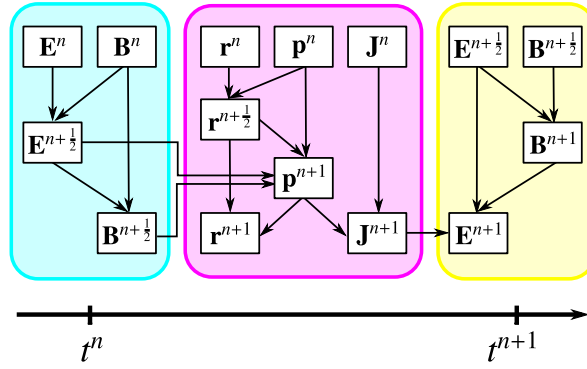


Figure 3.3 – Évolution et dépendances des quantités dans le code Epoch. La notation  $\mathbf{r}^n$  correspond à  $\mathbf{r}(t = n\Delta t)$ . Figure reproduite d’après [19].

était possible que des problèmes sans symétrie de révolution (avec d’autres types d’impulsions laser) puissent être considérés ; (iii) les ressources numériques à notre disposition étaient suffisantes pour la réalisation de simulations 3D.

Finalement, notons que nous avons dû coder et ajouter un module supplémentaire à la version 3D standard du code Epoch afin de tenir compte de l’impulsion  $\text{TM}_{01}$  incidente. La technique numérique utilisée pour cet ajout est décrite un peu plus loin, à la section §3.3.3.

### 3.2.4 Une itération typique dans Epoch

Tel que mentionné à la section §3.2.2, le noyau d’un code PIC consiste une procédure algorithmique cyclique. Ce cycle, auquel est associé une durée correspondant au pas de temps  $\Delta t$ , consiste généralement en quatre étapes :

1. Solution des champs électromagnétiques  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  sur la grille à l’aide des équations de Maxwell ;
2. Interpolation des champs électromagnétiques à la position des marqueurs dans l’espace et calcul de la force de Lorentz ;
3. Évolution de la position et de l’impulsion des particules selon la force de Lorentz ;
4. Projection des particules sur la grille et calcul de la densité de courant  $\mathbf{J}$ .

En pratique, afin d’améliorer la précision sur le calcul des différentes quantités, l’étape 1 (calcul des champs électromagnétiques) est séparée en deux parties. À partir des champs connus à  $t = n\Delta t$ , on évalue les champs à  $t = (n + 1/2)\Delta t$ . Les étapes 2, 3 et 4 sont ensuite réalisées. Le terme de courant  $\mathbf{J}$ , calculé à l’étape 4, est ensuite utilisé pour faire évoluer les champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  de  $t = (n + 1/2)\Delta t$  à  $t = (n + 1)\Delta t$ . L’évolution des différentes quantités suivies par Epoch est illustrée à la figure 3.3.

Dans les sections qui suivent, les deux blocs algorithmiques les plus importants du code Epoch sont passés en revue. Les algorithmes assurant l’évolution du champ électromagnétique sont d’abord présentés à la section §3.3. Par la suite, la section §3.4 introduit les algorithmes responsables du déplacement des marqueurs dans l’espace.

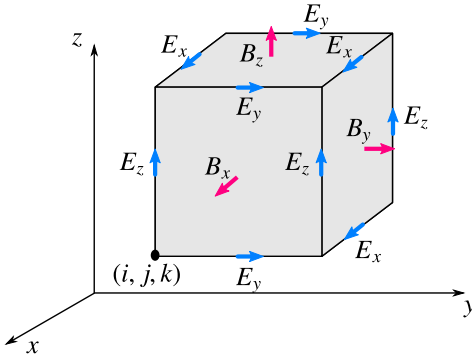


Figure 3.4 – Disposition des composantes du champ électromagnétique dans le cube de Yee. Chaque composante du champ électrique  $\mathbf{E}$  est décalée d’un demi pas de réseau dans la direction où elle pointe, tandis que chaque composante du champ magnétique  $\mathbf{B}$  est décalée d’un demi pas de réseau dans toutes les directions sauf celle où elle pointe.

### 3.3 Fonctionnement d’Epoch, partie I : champ électromagnétique

Le premier bloc algorithmique d’importance d’Epoch est constitué des procédures visant à modéliser l’évolution du champ électromagnétique. La résolution des équations de Maxwell est assurée par une variation de l’algorithme de Yee, tandis que les conditions frontières sont implémentées en utilisant la technique *perfectly matched layers* (PML) afin d’approximer un milieu infini. Afin de modéliser un faisceau laser incident, la méthode *scattered-field formulation* a été utilisée.

#### 3.3.1 Algorithme de Yee

L’algorithme de Yee est une méthode aux différences finies dans le domaine temporel (méthode FDTD) qui permet de modéliser l’évolution d’un champ électromagnétique en trois dimensions en solutionnant les deux équation rotationnelles de Maxwell [160]. Dans l’algorithme de Yee, on discrétise l’espace à l’aide d’une grille régulière dont les mailles sont de dimension  $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ . Les composantes des champs  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  ne sont pas disposées exactement sur les noeuds de la grille, mais plutôt de la manière illustrée à la figure 3.4. De cette manière, on remarquera que chaque composante du champ électrique est entourée de quatre composantes du champ magnétique, et vice-versa ; l’espace est ainsi rempli d’un enchaînement de boucles de Faraday et d’Ampère. C’est ce qui confère à l’algorithme de Yee une précision dite de second ordre<sup>6</sup>.

Dans ce qui suit, nous utiliserons la notation suivante pour les composantes du champ électromagnétique :

$$A(x = i\Delta x, y = j\Delta y, z = k\Delta z, t = n\Delta t) \equiv A_{i,j,k}^n. \quad (3.10)$$

Ainsi, les champs associés au noeud  $(i, j, k)$  de la grille au temps  $t = n\Delta t$  sont, d’après la figure 3.4,

<sup>6</sup>. Le lecteur peut consulter la section 2.4 du livre de Taflove [160] pour une explication de ce qu’est une méthode aux différences finies de second ordre.

$$\begin{aligned}
& E_x|_{i+1/2,j,k}^n \quad E_y|_{i,j+1/2,k}^n \quad E_z|_{i,j,k+1/2}^n \quad , \\
& B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^n \quad B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^n \quad B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^n \quad .
\end{aligned}$$

Notons par ailleurs que les courants, qui ne sont pas illustrés sur la figure 3.4, sont logiquement définis aux mêmes endroits que les composantes du champ électrique :

$$J_x|_{i+1/2,j,k}^n \quad J_y|_{i,j+1/2,k}^n \quad J_z|_{i,j,k+1/2}^n \quad .$$

Dans l'algorithme de Yee original, le champ électrique et le champ magnétique sont calculés à des temps différents séparés par  $\Delta t/2$  [160]. Par exemple,  $\mathbf{E}$  est évalué à  $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \dots$ , tandis que  $\mathbf{B}$  est évalué à  $t = 0.5\Delta t, 1.5\Delta t, 2.5\Delta t, \dots$ . Dans le code Epoch, de même que dans la plupart des codes PIC, il est nécessaire de connaître  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  simultanément à chaque  $t = (n + 1/2)\Delta t$ . On utilise alors une version modifiée de l'algorithme de Yee qui permet de passer de  $(\mathbf{E}^n, \mathbf{B}^n)$  à  $(\mathbf{E}^{n+1/2}, \mathbf{B}^{n+1/2})$  en deux étapes.

En premier lieu, à partir de la connaissance de  $(\mathbf{E}^n, \mathbf{B}^n)$ , on obtient  $(\mathbf{E}^{n+1/2}, \mathbf{B}^{n+1/2})$  à l'aide des équations aux différences finies suivantes [136] :

$$\frac{E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{c^2 \Delta t/2} = \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^n - B_z|_{i+1/2,j-1/2,k}^n}{\Delta y} - \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^n - B_y|_{i+1/2,j,k-1/2}^n}{\Delta z} - J_x|_{i+1/2,j,k}^n, \quad (3.11)$$

$$\frac{E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{c^2 \Delta t/2} = \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^n - B_x|_{i,j+1/2,k-1/2}^n}{\Delta z} - \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^n - B_z|_{i-1/2,j+1/2,k}^n}{\Delta x} - J_y|_{i,j+1/2,k}^n, \quad (3.12)$$

$$\frac{E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{c^2 \Delta t/2} = \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^n - B_y|_{i-1/2,j,k+1/2}^n}{\Delta x} - \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^n - B_x|_{i,j-1/2,k+1/2}^n}{\Delta y} - J_z|_{i,j,k+1/2}^n, \quad (3.13)$$

$$\frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^n}{\Delta t/2} = \frac{E_y|_{i,j+1/2,k+1}^{n+1/2} - E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{E_z|_{i,j+1,k+1/2}^{n+1/2} - E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta y}, \quad (3.14)$$

$$\frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^n}{\Delta t/2} = \frac{E_z|_{i+1,j,k+1/2}^{n+1/2} - E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} - \frac{E_x|_{i+1/2,j,k+1}^{n+1/2} - E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta z}, \quad (3.15)$$

$$\frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^n}{\Delta t/2} = \frac{E_x|_{i+1/2,j+1,k}^{n+1/2} - E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta y} - \frac{E_y|_{i+1,j+1/2,k}^{n+1/2} - E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta x}. \quad (3.16)$$

Après cette première étape, Epoch fait intervenir les routines d'évolution des particules, qui, essentiellement, déplacent les marqueurs et calculent le courant  $\mathbf{J}^{n+1}$  associé aux charges en mouvement. Une fois que cela est fait, les quantités  $(\mathbf{E}^{n+1}, \mathbf{B}^{n+1})$  sont calculées à partir de  $(\mathbf{E}^{n+1/2}, \mathbf{B}^{n+1/2})$  de la manière suivante :

$$\frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1} - B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta t/2} = \frac{E_y|_{i,j+1/2,k+1}^{n+1/2} - E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{E_z|_{i,j+1,k+1/2}^{n+1/2} - E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta y}, \quad (3.17)$$

$$\frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1} - B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta t/2} = \frac{E_z|_{i+1,j,k+1/2}^{n+1/2} - E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} - \frac{E_x|_{i+1/2,j,k+1}^{n+1/2} - E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta z}, \quad (3.18)$$

$$\frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1} - B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta t/2} = \frac{E_x|_{i+1/2,j+1,k}^{n+1/2} - E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta y} - \frac{E_y|_{i+1,j+1/2,k}^{n+1/2} - E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta x}, \quad (3.19)$$

$$\frac{E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1} - E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2}}{c^2 \Delta t / 2} = \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1} - B_z|_{i+1/2,j-1/2,k}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1} - B_y|_{i+1/2,j,k-1/2}^{n+1}}{\Delta z} - J_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1}, \quad (3.20)$$

$$\frac{E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1} - E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2}}{c^2 \Delta t / 2} = \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1} - B_x|_{i,j+1/2,k-1/2}^{n+1}}{\Delta z} - \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1} - B_z|_{i-1/2,j+1/2,k}^{n+1}}{\Delta x} - J_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1}, \quad (3.21)$$

$$\frac{E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1} - E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2}}{c^2 \Delta t / 2} = \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1} - B_y|_{i-1/2,j,k+1/2}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1} - B_x|_{i,j-1/2,k+1/2}^{n+1}}{\Delta y} - J_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1}. \quad (3.22)$$

Il peut être démontré que l'algorithme de Yee est stable si [160]

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \equiv \Delta t_{\text{lim}}. \quad (3.23)$$

Cette inégalité est connue sous le nom de *condition de Courant* ; si elle n'est pas respectée, le signal qui se propage sur la grille peut être amplifié de manière non physique. Dans le code Epoch, la valeur  $\Delta t = 0.95 \Delta t_{\text{lim}}$  est utilisée par défaut.

Afin de spécifier complètement le champ électromagnétique dans le domaine de simulation, les conditions frontières et le champ du faisceau incident doivent être spécifiés. Ces deux éléments font l'objet des prochaines sections.

### 3.3.2 Conditions aux frontières absorbantes

Afin de spécifier complètement le champ électromagnétique, tout domaine de simulation FDTD doit être borné par des conditions aux frontières appropriées. Ces conditions peuvent être de différente nature. Par exemple, pour simuler la propagation dans un guide d'onde métallique, on pourrait spécifier que certaines frontières du domaine de simulation sont des surfaces métalliques parfaitement conductrices.

Dans plusieurs problèmes d'intérêt, on cherche à modéliser l'évolution du champ électromagnétique dans une région qui n'est pas bornée dans une ou plusieurs directions. Étant donné que le domaine de simulation possède nécessairement une taille finie en raison des ressources numériques disponibles, il est nécessaire d'avoir recours à une stratégie numérique qui permet de modéliser l'extension du domaine de simulation vers l'infini. Cette stratégie est connue sous le nom de conditions aux frontières absorbantes, et plusieurs implémentations différentes existent [160].

Une manière couramment utilisée pour implémenter des conditions aux frontières absorbantes est la technique des couches *perfectly matched layers* (PML). C'est cette technique qui est utilisée dans Epoch pour simuler l'extension du domaine de simulation vers l'infini. Une description complète de l'implémentation des couches PML dans un code FDTD, quoiqu'assez simple conceptuellement, nécessiterait un espace beaucoup trop grand pour les besoins de ce document. Le lecteur intéressé pourra trouver une description complète de la technique au chapitre 7 du livre de Taflové [160]. Nous nous contenterons ici de décrire les grandes lignes du fonctionnement de la méthode.

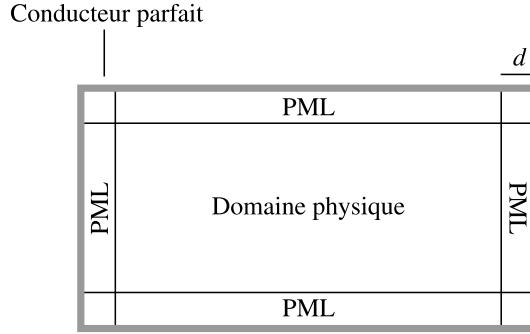


Figure 3.5 – Représentation schématique du domaine de simulation lors de la modélisation d’un espace infini en deux dimensions. Chaque frontière est terminée par une couche PML de  $d$  cellules. La grille complète (domaine physique + PML) est bordée par des conditions aux frontières de type conducteur électrique parfait.

La technique des couches PML consiste à terminer le domaine physique de simulation par un milieu artificiel absorbant (voir figure 3.5 pour une illustration en deux dimensions). Idéalement, ce milieu devrait n’avoir qu’une épaisseur de quelques couches sur la grille, ne générer aucune réflexion pour toute onde incidente, peu importe sa fréquence et son angle d’incidence, être fortement absorbant, et être efficace autant en champ proche qu’en champ lointain [160]. Bien qu’un tel milieu idéal soit probablement impossible à obtenir, une méthode qui s’avère efficace consiste à utiliser un milieu anisotrope artificiel qui possède des paramètres dont la valeur doit être adéquatement choisie.

Dans la couche PML en question, le champ électromagnétique peut être décrit dans le domaine spectral par les équations de Maxwell rotationnelles suivantes <sup>7</sup> :

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{E}} = -i\omega\mu_0\mathbf{s}\tilde{\mathbf{H}}, \quad (3.24)$$

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}} = i\omega\epsilon_0\mathbf{s}\tilde{\mathbf{E}}, \quad (3.25)$$

où  $\mathbf{s}$  est un tenseur diagonal défini par

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} s_x^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & s_x & 0 \\ 0 & 0 & s_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_y & 0 & 0 \\ 0 & s_y^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & s_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_z & 0 & 0 \\ 0 & s_z & 0 \\ 0 & 0 & s_z^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_y s_z s_x^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & s_x s_z s_y^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & s_x s_y s_z^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

La forme du tenseur  $\mathbf{s}$  fait en sorte qu’il n’y a, en théorie, aucune réflexion entre le domaine physique (de permittivité  $\epsilon = \epsilon_0$  et perméabilité  $\mu = \mu_0$ ) et la PML pour toute onde incidente de fréquence  $\omega$ , et ce peu importe la valeur de  $s_x$ ,  $s_y$  et  $s_z$ . De manière générale, on permet à  $s_x$ ,  $s_y$  et  $s_z$  de prendre la forme suivante :

$$s_x = \kappa_x + \frac{\sigma_x}{a_x + i\omega\epsilon_0}, \quad s_y = \kappa_y + \frac{\sigma_y}{a_y + i\omega\epsilon_0}, \quad s_z = \kappa_z + \frac{\sigma_z}{a_z + i\omega\epsilon_0}. \quad (3.27)$$

7. Comme la couche PML représente l’extension du domaine vers l’infini, on extrait généralement de la simulation les particules qui traversent l’interface entre la couche PML et la région physique. De cette manière, le terme  $\mathbf{J}$  est nul dans la couche PML.



Les paramètres  $\kappa_{x,y,z}$ ,  $\sigma_{x,y,z}$  et  $a_{x,y,z}$  vont déterminer à quel point l'onde transmise à travers la PML sera atténuée. En effet, comme la PML ne possède qu'une épaisseur de quelques couches ( $d = 6$  par défaut dans Epoch) et que la grille est généralement terminée par des conditions de type conducteur électrique parfait (tel qu'illustré sur la figure 3.5), il est important que l'atténuation dans la PML soit importante afin d'éviter qu'une fraction importante de la puissance soit réfléchiée dans le domaine physique. Par ailleurs, bien que la forme du tenseur  $s$  fait en sorte que le coefficient de réflexion à l'interface entre le domaine physique et la PML est théoriquement nul, une réflexion *numérique* peut survenir si le changement de paramètres du domaine physique vers la PML est trop brusque. Afin de diminuer cette réflexion numérique indésirable, une gradation polynomiale des paramètres  $\kappa_{x,y,z}$ ,  $\sigma_{x,y,z}$  et  $a_{x,y,z}$  est mise en place pour assurer une transition plus douce entre les milieux [160].

Enfin, comme la méthode FDTD opère dans le domaine temporel, on doit prendre la transformée de Fourier des équations (3.24)–(3.25). Cependant, dans la couche PML, les éléments du tenseur  $s$  dépendent de la fréquence  $\omega$ , ce qui implique que la transformée de Fourier n'est pas directe. L'approche utilisée dans Epoch, dite *convolutional perfectly matched layers* (CPML), consiste à solutionner la convolution résultante dans le domaine temporel à l'aide de la méthode de convolution récursive. Encore une fois, le lecteur intéressé est invité à consulter la section 7.9 de Taflove [160], où les expressions aux différences finies résultantes peuvent être obtenues.

### 3.3.3 Champ incident

Maintenant que les conditions aux frontières du domaine de simulation sont spécifiées de manière à émuler un espace infini, il reste à implémenter le champ laser incident. Pour tenir compte du champ électromagnétique d'une impulsion  $TM_{01}$  ultrabrève et fortement focalisée, nous avons implémenté la méthode *scattered-field formulation* (SFF) dans Epoch (voir section 5.10 de Taflove [160]).

La méthode SFF tire profit de la linéarité des équations de Maxwell. Plus spécifiquement, on considère que le champ électrique et le champ magnétique peuvent être décomposés comme la somme d'un champ incident et d'un champ diffusé, c'est-à-dire  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\text{inc}} + \mathbf{E}_{\text{scat}}$  et  $\mathbf{B} = \mathbf{B}_{\text{inc}} + \mathbf{B}_{\text{scat}}$ . Par conséquent, en vertu de la linéarité, on a :

$$\frac{\partial \mathbf{B}_{\text{inc}}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{B}_{\text{scat}}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}_{\text{inc}} - \nabla \times \mathbf{E}_{\text{scat}} \quad (3.28)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}_{\text{inc}}}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}_{\text{scat}}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{B}_{\text{inc}} + \nabla \times \mathbf{B}_{\text{scat}} - \mu_0 \mathbf{J} . \quad (3.29)$$

Puisque les champs incidents satisfont rigoureusement les équations de Maxwell dans le vide, les champs diffusés doivent être solutions aux équations

$$\frac{\partial \mathbf{B}_{\text{scat}}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}_{\text{scat}} \quad (3.30)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}_{\text{scat}}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{B}_{\text{scat}} - \mu_0 \mathbf{J} . \quad (3.31)$$

Dans la méthode SFF, seul le champ diffusé est solutionné via la routine FDTD. Lorsque le champ incident est requis, par exemple pour calculer la force qui s'applique sur un marqueur, il est calculé

à partir de la solution analytique connue pour  $\mathbf{E}_{\text{inc}}$  et  $\mathbf{B}_{\text{inc}}$ . Le désavantage principal de la méthode SFF est qu'elle requiert un temps de calcul considérable<sup>8</sup>. À titre comparatif, d'autres méthodes ne fonctionnent qu'avec une implémentation du champ incident au niveau des frontières du domaine physique, ce qui s'avère généralement moins coûteux. Toutefois, en plus de sa grande facilité d'implémentation, la méthode SFF possède l'avantage de faire en sorte que le champ incident est calculé de manière exacte aux points d'intérêts. En d'autres mots, le champ incident de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  n'est pas propagé numériquement sur la grille, et ne souffre donc pas des erreurs numériques inhérentes à ce processus [160]. Ceci est particulièrement important pour des impulsions ultrabrèves et fortement focalisées, pour lesquelles une propagation sur la grille nécessiterait une très grande résolution spatiale et temporelle afin d'éviter une erreur numérique importante.

### 3.4 Fonctionnement d'Epoch, partie II : particules

Le second bloc algorithmique principal d'Epoch consiste en une collection de procédures visant à assurer l'évolution des marqueurs dans l'espace. On présente ici les trois parties principales de ce bloc, soit la résolution des équations du mouvement, le calcul des courants, et la modélisation des processus d'ionisation.

#### 3.4.1 Résolution des équations du mouvement

Dans Epoch, les marqueurs se déplacent dans un espace continu. En d'autres mots, leur mouvement n'est pas restreint à la grille sur laquelle est calculé le champ électromagnétique.

Selon la théorie de l'électrodynamique classique, le mouvement d'une particule de charge  $q_\alpha$  et de masse  $m_\alpha$  soumise à un champ électromagnétique est décrit par la loi de force de Lorentz, donnée aux équations (2.7)–(2.8). Afin d'intégrer ces équations avec une précision au deuxième ordre, on procède de la manière suivante [136]. À partir de  $\mathbf{r}^n$  et  $\mathbf{p}^n$ , on fait d'abord avancer les marqueurs d'un demi pas de temps :

$$\mathbf{r}^{n+1/2} = \mathbf{r}^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}^n. \quad (3.32)$$

Afin de calculer  $\mathbf{p}^{n+1}$  avec une précision du second ordre, il faudrait utiliser l'équation suivante :

$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n + q_\alpha \Delta t \left( \mathbf{E}^{n+1/2} + \mathbf{v}^{n+1/2} \times \mathbf{B}^{n+1/2} \right). \quad (3.33)$$

où  $\mathbf{E}^{n+1/2}$  et  $\mathbf{B}^{n+1/2}$  sont les champs électrique et magnétique interpolés<sup>9</sup> à la position  $\mathbf{r}^{n+1/2}$ . Un problème apparaît tout de suite : la vitesse au temps  $(n + 1/2)\Delta t$  n'est pas connue. Afin contourner cette difficulté, on fait appel à une méthode dite *rotation de Boris* [20, 23]. Cette dernière consiste à passer de  $\mathbf{p}^n$  à  $\mathbf{p}^{n+1}$  en trois étapes : (i) accélération par le champ électrique, (ii) rotation par le champ

8. Le temps de calcul augmente linéairement avec le nombre de marqueurs.

9. La procédure permettant d'interpoler le champ électromagnétique à la position des particules est présentée un peu plus loin dans cette section.

magnétique et (iii) accélération par le champ électrique. Soit  $\mathbf{p}^-$  l'impulsion de la particule avant la rotation et  $\mathbf{p}^+$  son impulsion après la rotation. On a d'abord :

$$\mathbf{p}^- = \mathbf{p}^n + \frac{\Delta t}{2} q_\alpha \mathbf{E}^{n+1/2} . \quad (3.34)$$

On fait ensuite subir la rotation au vecteur impulsion :

$$\mathbf{p}^+ = \mathbf{p}^- + \Delta t q_\alpha \mathbf{v}^{n+1/2} \times \mathbf{B}^{n+1/2} , \quad (3.35)$$

où pour la vitesse  $\mathbf{v}^{n+1/2}$  on utilise l'approximation suivante :

$$\mathbf{v}^{n+1/2} = \frac{\mathbf{p}^- + \mathbf{p}^+}{2m_\alpha \left(1 + \frac{\mathbf{p}^- \cdot \mathbf{p}^-}{m_\alpha^2 c^2}\right)^{1/2}} . \quad (3.36)$$

Notons que le facteur gamma, qui peut théoriquement s'exprimer comme  $\gamma = (1 + |\mathbf{p}|^2/m_\alpha c^2)^{1/2}$ , est calculé en utilisant  $\mathbf{p}^-$  étant donné que la rotation ne change pas l'énergie du marqueur. En insérant cette expression pour  $\mathbf{v}^{n+1/2}$  dans l'expression pour  $\mathbf{p}^+$ , on obtient le système d'équations suivant :

$$\mathbf{p}^+ = \mathbf{p}^- + (\mathbf{p}^+ + \mathbf{p}^-) \times \boldsymbol{\tau} , \quad (3.37)$$

où

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\Delta t q_\alpha \mathbf{B}^{n+1/2}}{2m_\alpha \left(1 + \frac{\mathbf{p}^- \cdot \mathbf{p}^-}{m_\alpha^2 c^2}\right)^{1/2}} . \quad (3.38)$$

Ce système d'équations possède la solution suivante :

$$\mathbf{p}^+ = \mathcal{A} \mathbf{p}^- , \quad (3.39)$$

où la matrice  $\mathcal{A}$  est donnée par :

$$\mathcal{A} = \frac{1}{1 + \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\tau}} \begin{pmatrix} 1 + \tau_x^2 - \tau_y^2 - \tau_z^2 & 2\tau_x\tau_y + 2\tau_z & 2\tau_x\tau_z - 2\tau_y \\ 2\tau_x\tau_y - 2\tau_z & 1 - \tau_x^2 + \tau_y^2 - \tau_z^2 & 2\tau_y\tau_z + 2\tau_x \\ 2\tau_x\tau_z + 2\tau_y & 2\tau_y\tau_z - 2\tau_x & 1 - \tau_x^2 - \tau_y^2 + \tau_z^2 \end{pmatrix} . \quad (3.40)$$

On obtient l'impulsion au temps  $(n+1)\Delta t$  en appliquant la deuxième étape d'accélération par le champ électrique :

$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^+ + \frac{\Delta t}{2} q_\alpha \mathbf{E}^{n+1/2} . \quad (3.41)$$

Finalement, le marqueur est déplacé de  $\mathbf{r}^{n+1/2}$  à  $\mathbf{r}^{n+1}$  :

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{r}^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}^{n+1} . \quad (3.42)$$

Les équations du mouvement pour les marqueurs font intervenir les quantités  $\mathbf{E}^{n+1/2}$  et  $\mathbf{B}^{n+1/2}$  interpolés à la position  $\mathbf{r}^{n+1/2}$ . Pour ce faire, la procédure la plus simple serait de considérer les marqueurs

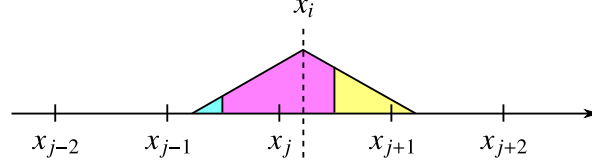


Figure 3.6 – Exemple en une dimension de la fonction de poids utilisé pour l’interpolation des champs dans Epoch.

comme des particules ponctuelles et ainsi interpoler linéairement les champs à la position  $\mathbf{r}^{n+1/2}$ . Toutefois, tel que mentionné à la section §3.2.2, les marqueurs correspondent à une certaine portion de la fonction de distribution du système, qui peut représenter plus d’une particule physique. Par conséquent, on leur donne généralement un certaine dimension, ce qui permet de réduire le niveau de bruit dans les régions où peu d’entre eux se trouvent.

À des fins de simplicité, considérons le cas unidimensionnel. Dans Epoch, les marqueurs possèdent par défaut une forme triangulaire. La fonction de poids  $S(\zeta)$  associée à un marqueur situé à la position  $x_i$  est donc (voir figure 3.6)

$$S(\zeta) = \frac{S_0}{\Delta x} \begin{cases} 1 - \frac{|x_i - \zeta|}{\Delta x} & |x_i - \zeta| \leq \Delta x \\ 0 & |x_i - \zeta| > \Delta x \end{cases} . \quad (3.43)$$

où  $S_0$  (que nous supposons pour la suite égal à 1) est le poids du marqueur et  $\zeta$  la variable représentant le point d’observation. Supposons maintenant un champ  $F$  (qui peut être n’importe quelle des trois composantes de  $\mathbf{E}$  ou  $\mathbf{B}$ ) défini aux points  $(\dots, x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, \dots)$ , tel qu’illustré sur la figure 3.6. Notons que dépendant de la composante de champ considérée, la grille formée par les  $x_j$  peut être décalée de  $\Delta x/2$  (c’est le cas pour  $E_x$  par exemple). Dans Epoch, on considère que le champ possède une valeur constante dans chaque intervalle de largeur  $\Delta x$  centré à  $x_j$  :

$$F(\zeta) = \begin{cases} \dots & \dots \\ F_{j-1} & x_{j-1} - \Delta x/2 \leq \zeta < x_{j-1} + \Delta x/2 \\ F_j & x_j - \Delta x/2 \leq \zeta < x_j + \Delta x/2 \\ F_{j+1} & x_{j+1} - \Delta x/2 \leq \zeta < x_{j+1} + \Delta x/2 \\ \dots & \dots \end{cases} . \quad (3.44)$$

Ainsi, le champ  $F$  appliqué sur un marqueur localisé à la position  $x_i$  tel qu’illustré à la figure 3.6 se calcule de la manière suivante :

$$F = \frac{1}{\Delta x} \left[ \int_{x_i - \Delta x}^{x_{j-1} + \Delta x/2} F_{j-1} \left(1 - \frac{x_i - \zeta}{\Delta x}\right) d\zeta + \int_{x_j - \Delta x/2}^{x_i} F_j \left(1 - \frac{x_i - \zeta}{\Delta x}\right) d\zeta \right. \\ \left. + \int_{x_i}^{x_{j+1} + \Delta x/2} F_j \left(1 - \frac{\zeta - x_i}{\Delta x}\right) d\zeta + \int_{x_{j+1} - \Delta x/2}^{x_i + \Delta x} F_{j+1} \left(1 - \frac{\zeta - x_i}{\Delta x}\right) d\zeta \right], \quad (3.45)$$

$$F = \frac{1}{2} F_{j-1} \left( \frac{1}{2} + \frac{x_j - x_i}{\Delta x} \right)^2 + F_j \left( \frac{3}{4} - \frac{(x_j - x_i)^2}{\Delta x} \right) + \frac{1}{2} F_{j+1} \left( \frac{1}{2} + \frac{x_i - x_j}{\Delta x} \right)^2 . \quad (3.46)$$

Mentionnons finalement que cette méthode se généralise très facilement à deux et trois dimensions.

### 3.4.2 Densité de charges et courant

Pour calculer le courant  $\mathbf{J}$  généré par le mouvement des marqueurs à chaque pas de temps, Epoch utilise l'algorithme de Villasenor et Buneman [181]. Ce dernier est basé sur la résolution de l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} . \quad (3.47)$$

L'avantage de cet algorithme est qu'il assure la conservation de la charge sur la grille.

Afin d'expliquer l'algorithme de Villasenor et Buneman, considérons le cas unidimensionnel encore une fois. Premièrement, à la position  $\mathbf{r}^{n+1/2}$  qui avait été calculée lors de l'étape de l'évolution des particules, on projette la densité de charge  $\rho^{n+1/2}$  sur la grille. Pour ce faire, on utilise encore une fois la fonction de poids  $S(\zeta)$  donnée à l'équation (3.43). Si on reprend l'exemple illustré à la figure 3.6, la densité de charge projetée sur la grille due au marqueur situé à la position  $x_i$  est, d'après le résultat obtenu à l'équation (3.46)

$$\rho_{j-2}^{n+1/2} = 0 \quad (3.48)$$

$$\rho_{j-1}^{n+1/2} = \frac{q_\alpha}{2\Delta x} \left( \frac{1}{2} + \frac{x_j - x_i}{\Delta x} \right)^2 \quad (3.49)$$

$$\rho_j^{n+1/2} = \frac{q_\alpha}{\Delta x} \left( \frac{3}{4} - \frac{(x_j - x_i)^2}{\Delta x} \right) \quad (3.50)$$

$$\rho_{j+1}^{n+1/2} = \frac{q_\alpha}{2\Delta x} \left( \frac{1}{2} + \frac{x_i - x_j}{\Delta x} \right)^2 \quad (3.51)$$

$$\rho_{j+2}^{n+1/2} = 0 . \quad (3.52)$$

Notons encore une fois que dépendant de la composante de courant considérée, la grille formée par les  $x_j$  peut être décalée de  $\Delta x/2$  (c'est le cas pour  $J_x$  par exemple).

Deuxièmement, à partir de la position  $\mathbf{r}^{n+1}$ , les marqueurs sont avancés d'un demi pas de temps en utilisant l'impulsion  $\mathbf{p}^{n+1}$  qui a été calculée lors de l'évolution des particules :

$$\mathbf{r}^{n+3/2} = \mathbf{r}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}^{n+1} . \quad (3.53)$$

Une fois la nouvelle position calculée, la densité de charge est projetée à nouveau sur la grille pour obtenir  $\rho^{n+3/2}$ .

Avec les quantités  $\rho^{n+1/2}$  et  $\rho^{n+3/2}$ , il est devenu donc possible d'évaluer  $\mathbf{J}^{n+1}$  avec une précision du deuxième ordre. En convertissant l'équation de continuité en expression aux différences finies, on obtient ainsi, pour la composante  $J_x$  générée par le marqueur considéré :

$$J_x|_j^{n+1} = J_x|_{j-1}^{n+1} - \frac{\Delta x}{\Delta t} (\rho_j^{n+3/2} - \rho_j^{n+1/2}) . \quad (3.54)$$

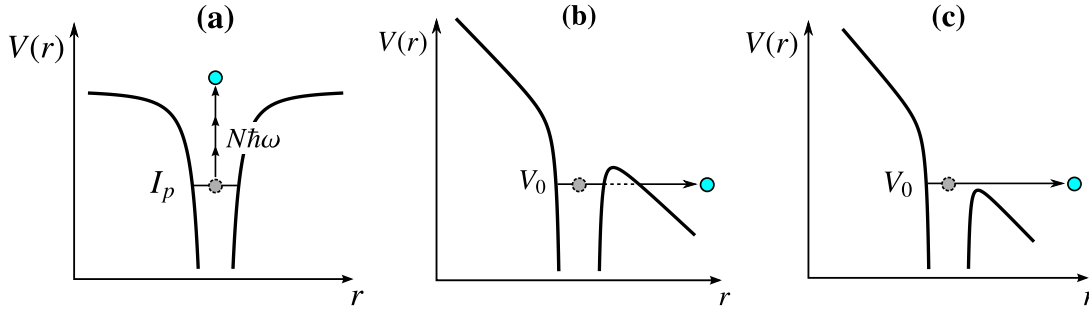


Figure 3.7 – Illustration schématique de l’ionisation (a) multiphotonique ; (b) tunnel ; (c) par suppression de barrière.

Il est important de noter que le courant généré par chaque marqueur est calculé indépendamment, et que toutes les contributions sont additionnées à la fin de la boucle d’itération sur les marqueurs pour obtenir le courant total.

### 3.4.3 Ionisation

Dans la réalité expérimentale du schéma d’accélération qui nous intéressera aux chapitres 6 et 7, les électrons que l’on souhaite accélérer sont générés lors de l’ionisation d’un gaz initialement neutre. Le code Epoch possède un module qui permet de modéliser l’ionisation des atomes lorsqu’ils sont soumis à un champ électromagnétique intense.

Lorsqu’un atome est soumis à un champ intense, l’ionisation peut se produire via trois mécanismes distincts. Ces trois mécanismes sont illustrés à la figure 3.7. Le premier est dit *ionisation multiphotonique*, et correspond à la situation où l’électron absorbe  $N$  photons d’énergie  $\hbar\omega$ , où  $N\hbar\omega$  est supérieur à l’énergie de liaison  $I_p$  de l’électron. Le second mécanisme est dit *ionisation tunnel*. Il correspond à la situation où le champ électrique du laser est suffisamment grand pour déformer significativement le puits de potentiel dans lequel se trouve l’électron. Il existe alors une probabilité non négligeable que l’électron s’échappe de son état lié par effet tunnel au travers de la barrière coulombienne. Dans le cas où l’amplitude du champ électrique est très élevée, la déformation de la barrière de Coulomb peut être suffisamment grande pour l’amener sous l’énergie de liaison de l’électron. On dit qu’il y a alors *ionisation par suppression de barrière*.

Afin de connaître quel mécanisme d’ionisation domine, on calcule généralement une quantité qui porte le nom de *paramètre de Keldysh* [77] :

$$\gamma_k = \frac{\omega \sqrt{2m_e I_p}}{eE}, \quad (3.55)$$

où  $\omega$  est la fréquence du champ électrique,  $I_p$  l’énergie de liaison de l’électron considéré et  $E$  l’amplitude du champ électrique. Physiquement, le paramètre de Keldysh correspond au ratio du potentiel d’ionisation sur l’énergie pondéromotrice de l’électron, ou alternativement, au ratio de la fréquence de la radiation sur la fréquence de l’effet tunnel. Lorsque  $\gamma_k^2 \gg 1$ , on se trouve dans un régime où

l'ionisation multiphotonique domine sur l'ionisation tunnel. Inversement, lorsque  $\gamma_k^2 \ll 1$ , c'est l'ionisation tunnel qui domine. Avec un laser qui possède une longueur d'onde de l'ordre du micron, on entre dans le régime dominé par l'ionisation tunnel dès que l'intensité est de l'ordre de  $10^{16}$  W/cm<sup>2</sup>. Toutefois, même pour une impulsion laser dont l'intensité est très élevée dans le plan focal, le processus d'ionisation multiphotonique peut quand même se produire au pied de l'impulsion ou bien loin du plan focal, là où l'amplitude du champ électromagnétique n'est pas maximale. Dans nos simulations PIC, les trois mécanismes d'ionisation sont pris en compte.

À ce jour, il n'existe aucun modèle général convaincant qui permet de décrire simultanément l'ionisation atomique dans les trois régimes mentionnés ci-haut. Afin de modéliser numériquement l'ionisation, on doit ainsi utiliser de concert plusieurs modèles différents. Une description détaillée de l'implémentation numérique des mécanismes d'ionisation dans Epoch peut être trouvée dans la référence [87]. Dans les paragraphes qui suivent, une brève description de chaque modèle d'ionisation est présentée. Pour cette présentation, une brève dérogation à l'utilisation des unités SI est effectuée ; nous utilisons exceptionnellement les unités atomiques en raison de leur ubiquité dans la littérature sur les modèles d'ionisation.

Afin de décrire l'ionisation en régime multiphotonique, Epoch utilise un modèle basé sur l'utilisation d'une section efficace d'absorption de plusieurs photons [38]. Le taux d'ionisation est alors donné, en unités atomiques, par

$$W_M = \sigma_n^{(K)} \left( \frac{cE^2}{8\pi\omega} \right)^K, \quad (3.56)$$

où  $K = \lfloor I_p/\hbar\omega + 1 \rfloor$  est le nombre de photons requis afin de libérer l'électron ( $\lfloor x \rfloor$  dénote la partie entière de  $x$ ) et l'indice  $n$  dénote le nombre quantique principal. La section efficace d'absorption  $\sigma_n^{(K)}$  est quant à elle donnée, en unités atomiques, par [38] :

$$\sigma_n^{(K)} = \frac{4.8(1.3)^{2K} E^{2(K-1)}}{c(K!)^2 n^5 \omega^{(10K-1)/3} K^{1/2} (2K-1)}. \quad (3.57)$$

De son côté, l'ionisation tunnel est généralement décrite sur le plan théorique à l'aide de la théorie d'Ammosov-Delone-Krainov, dite théorie ADK [2]. C'est sur cette théorie qu'est basée l'implémentation de l'ionisation tunnel dans Epoch<sup>10</sup>. Dans la théorie ADK, le taux d'ionisation par effet tunnel est donné, en unités atomiques, par

$$W = \frac{I_p 2^{2n^*}}{n^* \Gamma(n^* + l^* + 1) \Gamma(n^* - l^*)} \left[ \frac{3E}{\pi(2I_p)^{3/2}} \right]^{1/2} \frac{(2l+1)(l+|m|)!}{2^{|m|} (|m|)! (l-|m|)!} \times \left[ \frac{(2I_p)^{3/2}}{E} \right]^{2n^* - |m| - 1} \exp \left[ -\frac{2(2I_p)^{3/2}}{3E} \right]. \quad (3.58)$$

10. Notons que dans la littérature scientifique, il est parfois fait mention d'un modèle d'ionisation tunnel alternatif, soit la théorie de Perelomov-Popov-Terent'ev, dite théorie PPT [128]. La théorie PPT est un peu plus générale que la théorie ADK ; la théorie ADK correspond à la limite quasi-statique de la théorie PPT. Comme les deux modèles deviennent équivalents lorsque le paramètre de Keldysh  $\gamma_k \ll 1$ , nous croyons que les deux auraient donnés des résultats très similaires en ce qui concerne les simulations réalisées dans cette thèse.

Dans cette équation,  $n^* = Z/(2I_p)^{1/2}$  est le nombre quantique principal effectif (avec  $n = n_0^*$  pour l'état fondamental),  $Z$  est la charge de l'ion après ionisation (par exemple  $Z = 1$  pour l'ionisation d'un atome neutre),  $l^* = n_0^* - 1$  est le nombre quantique angulaire effectif,  $l$  et  $m$  sont les nombres quantiques angulaire et magnétique.

Dans Epoch comme dans la plupart des codes PIC, le nombre quantique magnétique  $m$  n'est pas pris en compte. Dans la plupart des codes PIC, on suppose généralement que  $m = 0$  pour tous les électrons. Or, le taux d'ionisation est significativement plus élevé pour  $m = 0$  que pour  $m \neq 0$  [2]. Ainsi, considérer  $m = 0$  dans tous les cas peut mener à une surestimation du taux d'ionisation lorsque  $m$  peut prendre plusieurs valeurs. Afin de remédier à ce problème, Epoch utilise le taux d'ionisation de la théorie ADK moyenné sur toutes les valeurs possibles de  $m$  [87] :

$$W_{ADK} = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{I_p 2^{2n^*}}{n^* \Gamma(2n^*)} \left[ \frac{2(2I_p)^{3/2}}{E} \right]^{2n^*-3/2} \exp \left[ -\frac{2(2I_p)^{3/2}}{3E} \right] \times \left\{ \sqrt{\frac{16(2I_p)^{3/2}}{\pi E}} \exp \left[ \frac{2(2I_p)^{3/2}}{E} \right] K_{l+1/2} \left( \frac{2(2I_p)^{3/2}}{E} \right) - 1 \right\}, \quad (3.59)$$

où  $K_{l+1/2}(x)$  est la fonction de Bessel modifiée de deuxième type d'ordre  $l + 1/2$ .

À intensité laser très élevée, l'ionisation peut procéder par suppression de barrière. La théorie ADK échoue à approximer le taux d'ionisation dans ce régime : à très haute intensité, le taux d'ionisation se met à diminuer au lieu d'augmenter, ce qui n'est pas physique [87]. Afin de modéliser l'ionisation à haute intensité, le code Epoch utilise le modèle classique de Posthumus *et al.* [13], dans lequel le taux d'ionisation par suppression de barrière (BSI) est donné, en unités atomiques, par :

$$W_{BSI} = \frac{(2I_p)^{3/2}}{4\pi Z} \left( 1 - \frac{I_p^2}{4ZE} \right) + W_{ADK}(E_T), \quad (3.60)$$

où  $E_T = Z^3/16n^{*4}$  correspond au champ électrique atomique.

Afin d'assurer une transition monotone et continue entre les trois régimes d'ionisation, Epoch applique les restrictions suivantes sur le taux d'ionisation en fonction de l'amplitude du champ électrique [87] :

$$W(E) = \begin{cases} \min(W_M(E), W_{ADK}(E_M)) & E \leq E_M \\ W_{ADK}(E) & E_M < E \leq E_T \\ \min(W_{ADK}(E), W_{BSI}(E)) & E_T < E \leq E_B \\ W_{BSI}(E) & E > E_B \end{cases} \quad (3.61)$$

où  $\gamma_k(E_M) = 0.5$  est le point utilisé pour marquer transition entre les régimes d'ionisation multiphotonique et tunnel, et  $dW_{ADK}(E_B)/dE = 0$  correspond au point à partir duquel le taux d'ionisation se met à diminuer dans le modèle ADK.

Les taux d'ionisation mentionnés ci-haut sont instantanés et sont calculés à chaque  $t = (n + 1)\Delta t$ , soit après la seconde étape d'évolution du champ électromagnétique (voir section §3.3.1). Afin d'implémenter temporellement l'ionisation dans Epoch, une dynamique de type désintégration radioactive est



utilisée :

$$\frac{dN}{dt} = -WN . \quad (3.62)$$

Ainsi, la probabilité d'avoir un événement d'ionisation dans un intervalle de durée  $\Delta t$  est  $P = 1 - e^{-W\Delta t}$ . Afin d'implémenter cette dynamique dans Epoch, un temps d'ionisation est calculé selon une distribution exponentielle<sup>11</sup> à l'aide de l'expression  $t_{ion} = -\frac{1}{W} \log(1 - u)$ , où  $u$  est un nombre aléatoire distribué uniformément entre 0 et 1. Il y a ensuite ionisation si  $t_{ion} < \Delta t$ . Notons que plusieurs événements d'ionisation consécutifs peuvent avoir lieu pendant le même pas de temps en autant que  $t_{ion,1} + t_{ion,2} + \dots < \Delta t$ .

Finalement, après un événement d'ionisation, l'électron est relâché dans le domaine physique à la vitesse de l'ion parent et est pris en charge par la force de Lorentz à l'itération suivante. Une correction est appliquée à l'ion parent afin de respecter la conservation de l'impulsion. Afin de tenir compte du travail fait par le champ électrique pour ioniser une particule, Epoch utilise la méthode de Mulser *et al.* [118], dans laquelle une correction en accord avec le théorème de Poynting est appliquée à la densité de courant sur la grille. Plus spécifiquement, lors de l'absorption d'une énergie  $U_{ion} = I_{p,1} + I_{p,2} + \dots$ , où  $I_{p,i}$  est l'énergie d'ionisation du  $i$ -ème événement d'ionisation consécutif, par un marqueur de poids  $S_0$ , un courant correspondant de valeur

$$\mathbf{J}_{ion} = \frac{S_0 U_{ion}}{\Delta t} \frac{\mathbf{E}}{|\mathbf{E}|^2} \quad (3.63)$$

est généré et est distribué sur la grille selon la fonction de poids du marqueur correspondant.

---

11. Ceci correspond à la *méthode de la transformation inverse* [131].



## Chapitre 4

# Accélération d'un électron sur l'axe optique

Article original :

**Electron acceleration driven by ultrashort and nonparaxial radially polarized laser pulses**

Vincent Marceau<sup>1</sup>, Alexandre April<sup>1,2</sup> et Michel Piché<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centre d'Optique, Photonique et Laser, Université Laval, Québec, Québec, Canada.

<sup>2</sup>Cégep François-Xavier-Garneau, Québec, Québec, Canada.

Référence : Optics Letters 37, 2442–2444 (2012).

© 2012 The Optical Society of America (§4.2–§4.7)

## 4.1 Avant-propos

Ayant en main les outils théoriques et numériques nécessaires à la modélisation de l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$ , nous présentons dans un premier temps une étude du cas le plus simple, soit la dynamique à une dimension d'un électron initialement au repos sur l'axe optique.

Afin de mettre en contexte les résultats présentés dans les sections suivantes, il est pertinent de rappeler brièvement quelques résultats publiés par Wong et Kärtner en 2010 [186]. Ces deux chercheurs se sont intéressés à la modélisation de l'accélération d'un électron sur l'axe optique par une impulsion  $TM_{01}$  paraxiale. Plus spécifiquement, ils ont cherché à déterminer le gain en énergie maximal de l'électron en fonction de la puissance laser pour différentes combinaisons de taille de faisceau et de durée d'impulsion. Les résultats qu'ils ont obtenus sont reproduits à la figure 4.1, où le gain en énergie maximal est normalisé par sa limite théorique [voir équation (2.101)]. Deux observations importantes peuvent être effectuées. Premièrement, la puissance seuil requise pour avoir une accélération importante diminue lorsque la taille du faisceau diminue. Deuxièmement, à haute puissance, l'accélération est plus efficace lorsqu'une impulsion courte est utilisée. Les résultats de Wong et Kärtner laissent ainsi entrevoir l'intérêt potentiel des impulsions ultrabrèves et fortement focalisées pour l'accélération d'électrons. Toutefois, leur cadre théorique est limité par l'approximation paraxiale et l'approximation de l'enveloppe lente, ce qui les empêche d'étudier la dynamique dans ce régime.

Motivés par ces résultats et armés de la solution exacte pour l'impulsion  $TM_{01}$  qui a été obtenue au chapitre 2, nous avons donc entrepris d'effectuer une étude systématique de l'accélération d'électrons sur l'axe optique en régime d'impulsions ultrabrèves et non paraxiales. Il est important de noter que cette analyse est rendue possible grâce à l'efficacité numérique de la solution exacte. En effet, comme nous le verrons bientôt, il est nécessaire pour obtenir la valeur maximale du gain en énergie d'optimiser deux paramètres. Ce travail d'optimisation peut devenir assez lourd numériquement, d'où l'importance d'avoir une solution efficace pour le calcul du champ électromagnétique.

Ce chapitre est divisé en deux parties. La première partie (sections §4.2 à §4.7) correspond à un article qui a été publié dans la revue *Optics Letters* en juin 2012 [103]. Elle est par conséquent rédigée en anglais, à l'exception d'une version française du résumé. La seconde partie (sections §4.8 à §4.12) consiste en une série de compléments qui viennent apporter quelques précisions et résultats supplémentaires.

## 4.2 Résumé

À l'aide d'une solution exacte aux équations de Maxwell, on analyse l'accélération d'électrons par impulsions laser de polarisation radiale dans le régime des impulsions ultrabrèves et non paraxiales. Nous démontrons que la puissance seuil requise pour observer une accélération importante est significativement réduite lorsque l'impulsion laser est très fortement focalisée. Par ailleurs, avec une impulsion dont la durée est de l'ordre d'un cycle optique, il est possible d'accélérer un électron jus-

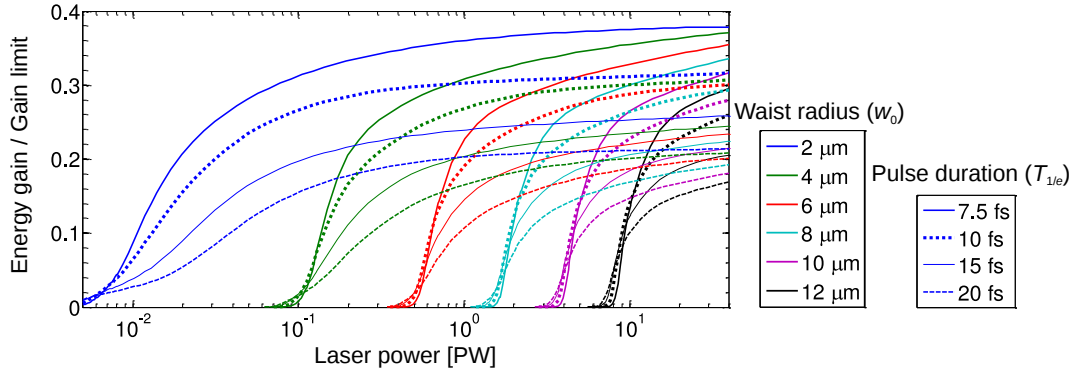


Figure 4.1 – Gain en énergie maximal d’un électron initialement au repos sur l’axe optique en fonction de la puissance laser pour différentes combinaisons de la taille du faisceau et de la durée de l’impulsion. Les résultats sont obtenus sous l’approximation paraxiale et l’approximation de l’enveloppe lente, ce qui impose une limite à la taille du faisceau et à la durée d’impulsion qui peuvent être utilisées. Figure tirée de [186].

qu’à 80% de la limite théorique du gain en énergie, ce qui correspond à près du double de ce qui peut être atteint avec des impulsions laser paraxiales de quelques cycles optiques. Nos résultats démontrent que l’accélération d’électrons par champ direct dans le vide est à la portée de la technologie laser actuelle.

### 4.3 Abstract

Exact closed-form solutions to Maxwell’s equations are used to investigate the acceleration of electrons in vacuum driven by ultrashort and nonparaxial radially polarized laser pulses. We show that the threshold power above which significant acceleration takes place is greatly reduced by using a tighter focus. Moreover, electrons accelerated by tightly focused single-cycle laser pulses may reach around 80% of the theoretical energy gain limit, about twice the value previously reported with few-cycle paraxial pulses. Our results demonstrate that the direct acceleration of electrons in vacuum is well within reach of the current laser technology.

### 4.4 Introduction

The advent of ultra-intense laser facilities has triggered a growing interest in laser-driven electron acceleration, opening new possibilities for the development of compact electron accelerators [99]. Among the proposed laser acceleration schemes, the use of ultra-intense radially polarized laser beams in vacuum is very promising [21, 48, 75, 138, 139, 178, 186]. This scheme, also termed *direct acceleration*, takes advantage of the strong longitudinal electric field at beam center to accelerate electrons to relativistic velocities along the optical axis. According to numerical simulations, clouds of electrons accelerated by radially polarized laser beams could form well collimated attosecond electron bunches [75, 178]. However, the main drawback of direct acceleration is that substantial acceleration

only occurs above a high threshold power [187]; for electrons initially at rest to reach MeV energies, laser power of at least a few terawatts would be required [186].

Extensive numerical studies of electron acceleration by radially polarized laser beams have shown that reducing the pulse duration and the beam waist size generally increases the maximum energy gain [186, 188]. However, these analyses were limited by the paraxial and slowly varying envelope approximations. When the beam waist size is of the order of the laser wavelength and the pulse duration approaches the single-cycle limit, these approximations lose their validity.

In this Letter, we provide a simple method to study the direct acceleration of electrons in the nonparaxial and ultrashort pulse regime. Under tight focusing conditions, we show that an electron initially at rest on the optical axis may be accelerated to MeV energies with a laser power as low as a few gigawatts. At high laser power, we demonstrate that the use of nonparaxial single-cycle pulses allows for a more efficient acceleration, reaching about 80% of the theoretical energy gain limit, in comparison to 40% for pulses limited by the paraxial and slowly varying envelope approximations [186].

## 4.5 Ultrashort and tightly focused $\text{TM}_{01}$ pulses

In order to be accurately described, ultrashort and tightly focused pulsed beams must be modeled as exact solutions to Maxwell's equations. Recently, April [7] presented a simple and complete strategy to obtain exact closed-form solutions for the electromagnetic fields of such beams. Following his approach, an isodiffracting  $\text{TM}_{01}$  pulsed beam propagating in vacuum along the  $z$  axis (beam waist at  $z=0$ ) is described by the following field components in cylindrical coordinates  $(r, \phi, z)$  [7]:

$$E_r(\mathbf{r}, t) = \frac{3\Psi_0 \sin \tilde{\theta} \cos \tilde{\theta}}{\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(0)}}{\tilde{R}^2} + \frac{G_+^{(1)}}{c\tilde{R}} + \frac{G_-^{(2)}}{3c^2} \right), \quad (4.1)$$

$$E_z(\mathbf{r}, t) = \frac{\Psi_0}{\tilde{R}} \left[ \frac{(3 \cos^2 \tilde{\theta} - 1)}{\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(0)}}{\tilde{R}} + \frac{G_+^{(1)}}{c} \right) - \frac{\sin^2 \tilde{\theta}}{c^2} G_-^{(2)} \right], \quad (4.2)$$

$$B_\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\Psi_0 \sin \tilde{\theta}}{c\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(1)}}{c\tilde{R}} + \frac{G_+^{(2)}}{c^2} \right). \quad (4.3)$$

The physical electric and magnetic fields are obtained by taking the real part of (4.1)–(4.3);  $c$  is the speed of light in free space,  $\eta_0$  is the impedance of free space,  $\Psi_0$  is a constant amplitude,  $a$  is a real positive constant called the confocal parameter (identical for all frequency components in an isodiffracting pulsed beam),  $\tilde{R} = [r^2 + (z + ia)^2]^{1/2}$ ,  $\sin \tilde{\theta} = r/\tilde{R}$ ,  $\cos \tilde{\theta} = (z + ia)/\tilde{R}$ , and  $G_\pm^{(n)} = \partial_t^n [f(\tilde{t}_-) \pm f(\tilde{t}_+)]$  with  $f(t) = e^{-i\phi_0} (1 - i\omega_0 t/s)^{-(s+1)}$  and  $\tilde{t}_\pm = t \pm \tilde{R}/c + ia/c$ . The function  $f(t)$  is the inverse Fourier transform of the Poisson-like frequency spectrum of the pulse, given by [31]

$$F(\omega) = 2\pi e^{-i\phi_0} \left( \frac{s}{\omega_0} \right)^{s+1} \frac{\omega^s e^{-s\omega/\omega_0}}{\Gamma(s+1)} H(\omega), \quad (4.4)$$

where  $s$  is a real positive parameter,  $\phi_0$  is the constant pulse phase,  $\omega_0 = ck_0$  is the frequency of maximum amplitude, and  $H(\omega)$  is the Heaviside step function. The fields given by Eqs. (4.1)–(4.3)

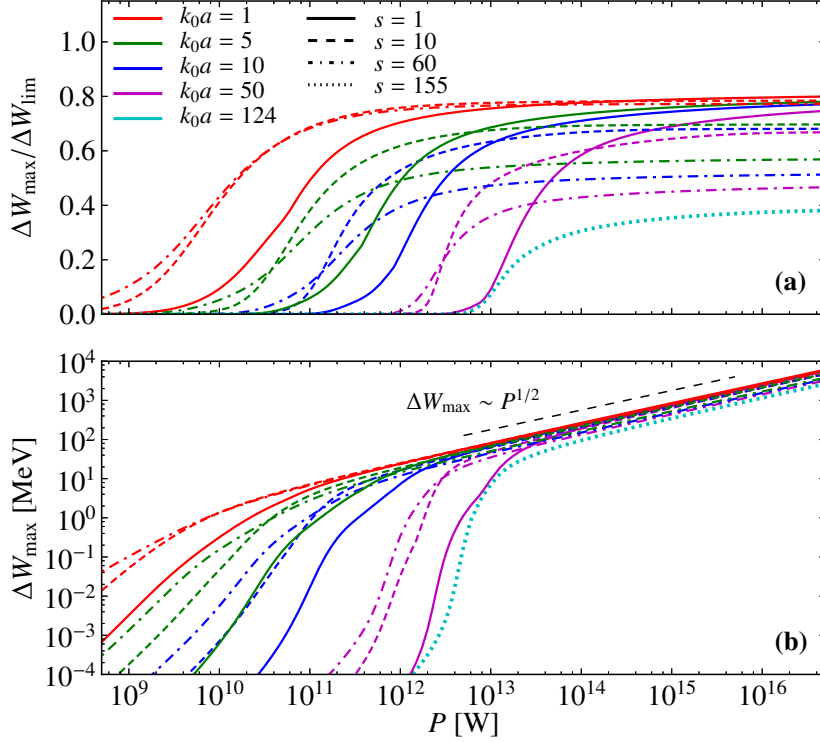


Figure 4.2 – Maximum (a) normalized and (b) absolute energy gain of an electron initially at rest on the optical axis versus the laser pulse power for different values of  $k_0a$  and  $s$ . The values of  $s$  used represent single-cycle ( $s = 1$ ), two-cycle ( $s = 10$ ), and five-cycle ( $s = 60$ ) pulses. The gray dashed curve ( $k_0a = 124$ ,  $s = 155$ ) corresponds to the limit of the paraxial regime investigated in [186]. The energy gain is evaluated 20 ps after the passage of the pulse at  $z = 0$ .

may be produced by focusing a collimated radially polarized input beam with a parabolic mirror of large aperture [9].

The degree of paraxiality of the beam can be characterized by  $k_0a$ , which is monotonically related to the beam waist size  $w_0$  and Rayleigh range  $z_R$  at wavelength  $\lambda_0$  by  $z_R = k_0w_0^2/2 = [\sqrt{1 + (k_0a)^2} - 1]/k_0$  [134]. Therefore,  $k_0a \sim 1$  for tight focusing conditions, while  $k_0a \gg 1$  for paraxial beams, in which case  $z_R \approx a$ . The pulse duration  $T_{1/e}$ , which may be defined as the single-sided  $\exp(-1)$  duration of  $|E_z|$ , increases monotonically with  $s$ . The power  $P$  carried along the  $z$  axis by the pulse is found by numerically integrating the  $z$  component of the time-averaged Poynting vector,  $\mathbf{S}_{av} = (2\mu_0)^{-1} \mathbf{E} \times \mathbf{B}^*$ , in the transverse plane at  $z = t = 0$ . Finally, in the limit  $k_0a \gg 1$  and  $s \gg 1$ , Eqs. (4.1)–(4.3) reduce to the fields of the paraxial  $\text{TM}_{01}$  Gaussian pulse used in [48] (see Complement I in Sec. §4.8).

## 4.6 Electron acceleration in the ultrashort and nonparaxial regime

To simulate the laser-driven electron acceleration, the conventional Lorentz force equation [48] was integrated numerically for an electron initially at rest on the optical axis outside the laser pulse at

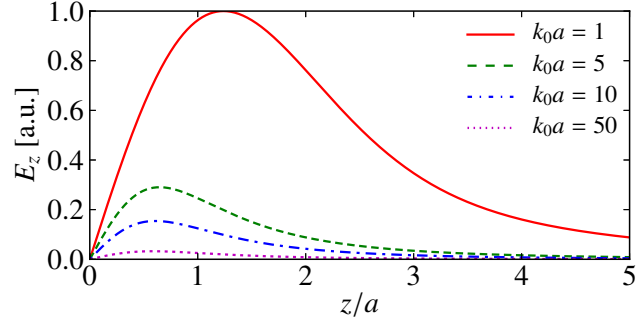


Figure 4.3 – Longitudinal on-axis electric field at pulse peak  $t = z/c$  (computed for  $\lambda_0 = 800$  nm) versus distance from beam waist for different values of  $k_0 a$ . The other parameters are  $\phi_0 = \pi$ ,  $s = 10$ , and  $P = 5 \times 10^{11}$  W.

position  $z_0$ . Under an appropriate change of coordinates, namely  $\zeta = z/a$ ,  $\rho = r/a$ , and  $\tau = \omega_0 t$ , it is possible to show that the dynamics is totally independent of the wavelength of maximum field amplitude  $\lambda_0 = 2\pi/k_0$  and only depends on the parameters  $k_0 a$ ,  $s$ , and  $P$  (see Complement II in Sec. §4.9). For various values of  $k_0 a$  and  $s$ , the electron initial position  $z_0$  and the pulse phase  $\phi_0$  were optimized to obtain the maximum energy gain  $\Delta W_{\max}$  at different laser powers  $P$  (for more details about the optimization procedure, see Complement III in Sec. §4.10). The variation of  $\Delta W_{\max}$  with  $P$  is illustrated in Fig. 4.2. In Fig. 4.2(a), the energy gain is normalized by the theoretical energy gain limit,  $\Delta W_{\text{lim}} = -e \int_0^\infty E_z(r=0, t=z/c) dz$  with  $\phi_0 = 0$ , which is equal to the energy gain of an electron that hypothetically remains at pulse peak from  $z = 0$  to infinity [48, 186]. For comparison, the case  $w_0 = 2 \mu\text{m}$  and  $T_{1/e} = 7.5$  fs at  $\lambda_0 = 800$  nm (which gives  $k_0 a \approx 124$  and  $s \approx 155$ ) is also shown in Fig. 4.2. This case was previously studied in [186] as the limit imposed by the paraxial and slowly varying envelope approximations.

At constant pulse duration, Fig. 4.2(a) shows that the threshold laser power above which significant acceleration takes place is dramatically reduced as the beam focus is made tighter, i.e., as  $k_0 a$  decreases. This can be attributed to the fact that the amplitude of the longitudinal on-axis electric field component increases as  $k_0 a$  decreases (see Fig. 4.3). Figure 4.2 also shows that longer pulses have a lower acceleration threshold and allow for higher energy gains at low laser power. This agrees with [186], where the same phenomenon was reported to a weaker extent. This could be explained by the fact that the first cycles of the pulse preaccelerate the electron before it reaches the pulse peak, thus lowering the required threshold power. According to Fig. 4.2(b), MeV energies may be reached at laser power as low as 10 GW with tightly focused few-cycle pulses. In comparison, a power of about 10 TW is required to reach the same energy gain with paraxial pulses. From a practical standpoint, it is however important to notice that while decreasing the acceleration threshold power, the use of tightly focused pulsed beams may reduce the number of fast electrons that are produced. The influence of  $k_0 a$  and  $s$  on the total accelerated charge in three-dimensional simulations is the object of ongoing research.

At higher laser power, the use of shorter laser pulses yields a more efficient acceleration. Indeed,



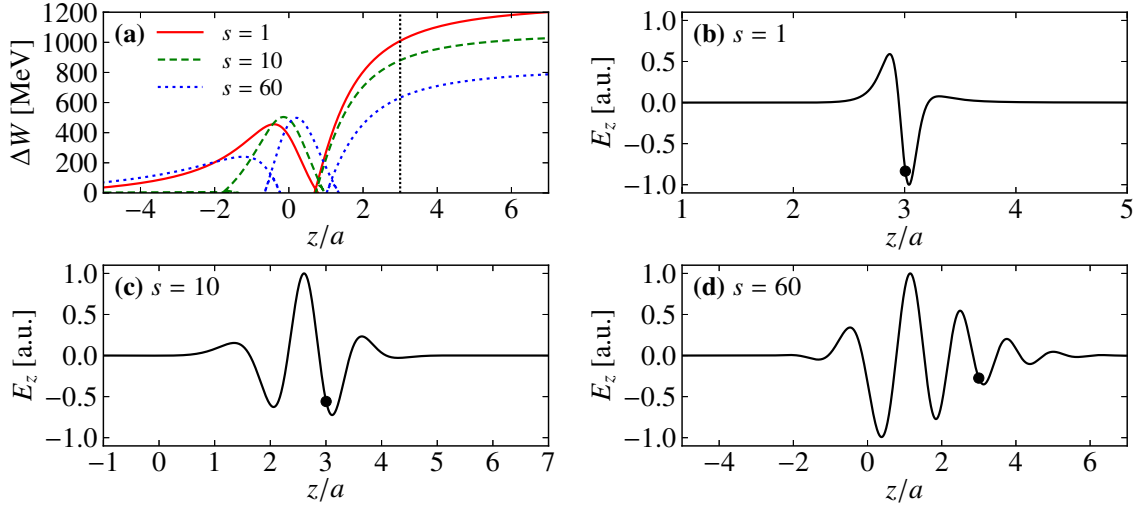


Figure 4.4 – (a) Energy gain versus distance from beam waist for an electron accelerated by pulses of various durations with  $k_0 a = 5$ ,  $P = 2.5 \times 10^{15}$  W. For each pulse, a snapshot of the longitudinal electric field  $E_z$  (computed for  $\lambda_0 = 800$  nm) was taken at the position indicated by the dotted vertical line and is shown in (b)–(d). The filled circle in (b)–(d) indicates the position of the electron on the optical axis. The  $z_0$  and  $\phi_0$  parameters are chosen to obtain the maximum energy gain with each pulse.

Fig. 4.2(a) shows that electrons accelerated by a tightly focused single-cycle ( $s = 1$ ) pulse may reach 80% of the theoretical energy gain limit, compared to 40% with a paraxial few-cycle pulse. Shorter pulses lead to higher maximum energy gains for two reasons. First, we see in Fig. 4.4(a) that with a shorter pulse, the electron enters its final accelerating cycle closer (in terms of  $a$ ) to the focus, thus increasing the energy it is able to extract from the electric field. Second, as it is shown in Figs. 4.4(b)–(d), a pulse of shorter duration allows the electron to move closer to the pulse peak during its final accelerating cycle; with longer durations, the electron is instead accelerated by the front edge of the pulse. Figure 4.2(b) also shows that reducing the pulse duration and using a tighter focus increase the absolute value (in MeVs) of the maximum energy gain at high laser power. In the high power regime,  $\Delta W_{\max}$  scales as  $P^{1/2}$ , in agreement with results obtained under paraxial conditions [48, 138, 186].

## 4.7 Conclusion

In summary, our results highlight the importance of going beyond the paraxial and slowly varying envelope approximations in the analysis of electron acceleration in vacuum by radially polarized laser beams. We have provided a simple method to investigate the acceleration dynamics in the nonparaxial and ultrashort pulse regime by using exact closed-form solutions to Maxwell’s equations. With tightly focused single-cycle laser pulses, electrons may reach around 80% of the theoretical energy gain limit, twice the value obtained with paraxial few-cycle pulses. We have also demonstrated the possibility of significantly reducing the acceleration threshold power by using a tighter focus. Ac-

ording to our results, it would be possible, under tight focusing conditions such as those obtained with a high-aperture parabolic mirror, to reach MeV energy gains with laser power of a few gigawatts. This is about  $10^3$  times lower than the power required to reach the same energy gain in the limit of the paraxial approximation. Besides being much more common in laboratories, gigawatt lasers can be operated at higher repetition rates than terawatt lasers and allow for easier pulse compression. Direct acceleration of electrons in vacuum by radially polarized laser beams is therefore much more accessible to the current laser technology than previously expected; its experimental realization is currently under investigation [126].

#### 4.8 Complément I : Champ électromagnétique de l'impulsion $\text{TM}_{01}$ dans la limite $k_0a \gg 1$ et $s \gg 1$

Comme cela a été introduit dans l'avant-propos, les résultats présentés dans l'article qui fait l'objet de ce chapitre se veulent en quelque sorte une extension des résultats de Wong et Kärtner [186] au régime des impulsions ultrabrèves et non paraxiales. Tel que mentionné à la section §4.5, la solution exacte pour le champ électromagnétique de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  permet d'assurer la continuité avec le régime des impulsions gaussiennes et paraxiales dans la limite  $k_0a \gg 1$  et  $s \gg 1$ . Dans ce complément, nous en effectuons la démonstration explicite.

Nous allons effectuer le calcul pour la composante  $E_z$  du champ. La démarche est essentiellement similaire pour les composantes  $E_r$  et  $B_\phi$  et ne sera pas reproduite ici. Tout d'abord, la solution exacte pour  $E_z$  est donnée par l'expression :

$$E_z(\mathbf{r}, t) = \frac{\Psi_0}{\tilde{R}} \left[ \frac{(3 \cos^2 \tilde{\theta} - 1)}{\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(0)}}{\tilde{R}} + \frac{G_+^{(1)}}{c} \right) - \frac{\sin^2 \tilde{\theta}}{c^2} G_-^{(2)} \right]. \quad (4.5)$$

On considère en régime paraxial que le point d'observation est situé près de l'axe optique et que  $k_0a \gg 1$ . On peut ainsi développer en série de Taylor le rayon complexe  $\tilde{R}$  de la manière suivante :

$$\tilde{R} = [r^2 + (z + ia)^2]^{1/2} \approx z + ia + \frac{r^2}{2(z + ia)}. \quad (4.6)$$

Tournons nous maintenant vers les fonctions  $f^{(n)}(\tilde{t}_\pm)$  qui entrent dans la définition des facteurs  $G_\pm^{(n)}$  :

$$f^{(n)}(t) = e^{-i\phi_0} \frac{\Gamma(s + n + 1)}{\Gamma(s + 1)} \left( \frac{i\omega_0}{s} \right)^n \left( 1 - \frac{i\omega_0 t}{s} \right)^{-(s+n+1)}. \quad (4.7)$$

Dans la limite  $s \gg 1$ , on peut d'abord approximer :

$$\frac{\Gamma(s + n + 1)}{s^n \Gamma(s + 1)} = \frac{(s + n)(s + n - 1) \cdots (s + 1)}{s^n} \approx 1. \quad (4.8)$$

Par ailleurs, dans la limite paraxiale, on a :

$$\tilde{t}_+ \approx t + \frac{z}{c} + \frac{r^2}{2c(z + ia)} + \frac{2ia}{c}, \quad (4.9)$$

$$\tilde{t}_- \approx t - \frac{z}{c} - \frac{r^2}{2c(z+ia)}. \quad (4.10)$$

Les fonctions  $G_{\pm}^{(n)}$  sont constituées d'une composante propageante,  $f^{(n)}(\tilde{t}_-)$ , et d'une composante contre-propageante,  $f^{(n)}(\tilde{t}_+)$ . Considérons cette dernière en premier :

$$f^{(n)}(\tilde{t}_+) \approx (i\omega_0)^n e^{-i\phi_0} \left[ 1 + \frac{2k_0a}{s} - \frac{i\omega_0}{s} \left( t + \frac{z}{c} + \frac{r^2}{2c(z+ia)} \right) \right]^{-(s+n+1)}. \quad (4.11)$$

Près du sommet de la composante contre-propageante, on a  $s \gg \omega_0[t + z/c + r^2/2c(z+ia)]$ . Le troisième terme entre crochets dans l'expression ci-haut est donc beaucoup plus petit que l'unité. Tout dépendant de la grandeur du deuxième terme entre crochets, soit  $2k_0a/s$ , deux analyses différentes doivent être effectuées.

Dans le cas où  $k_0a \ll s$ , la quantité  $2k_0a/s$  est également beaucoup plus petite que l'unité. On peut d'abord écrire

$$f^{(n)}(\tilde{t}_+) \approx (i\omega_0)^n e^{-i\phi_0} \exp \left\{ -(s+n+1) \left[ 1 + \frac{2k_0a}{s} - \frac{i\omega_0}{s} \left( t + \frac{z}{c} + \frac{r^2}{2c(z+ia)} \right) \right] \right\}. \quad (4.12)$$

En utilisant le développement en série de Taylor du logarithme,  $\ln(1+x) \approx x - x^2/2$  pour  $|x| \ll 1$ , on obtient :

$$f^{(n)}(\tilde{t}_+) \approx (i\omega_0)^n e^{-i\phi_0} \exp \left\{ -(s+n+1) \left[ \left( \frac{2k_0a}{s} - \frac{i\omega_0 c_+}{s} \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{2k_0a}{s} - \frac{i\omega_0 c_+}{s} \right)^2 \right] \right\}, \quad (4.13)$$

où on a défini  $c_+ \equiv t + z/c + r^2/2c(z+ia)$  pour simplifier la notation. On voit alors que l'amplitude de  $f^{(n)}(\tilde{t}_+)$  décroît comme

$$f^{(n)}(\tilde{t}_+) \sim \exp \left[ -2k_0a \left( 1 - \frac{k_0a}{s} \right) \right]. \quad (4.14)$$

Puisque  $k_0a \gg 1$  et que nous avons supposé que  $k_0a \ll s$ , on voit que la composante contre-propageante tend vers zéro comme  $f^{(n)}(\tilde{t}_+) \sim e^{-2k_0a}$ . Sa contribution peut donc être négligée.

Dans le cas où la condition  $k_0a \ll s$  n'est pas vérifiée, la quantité  $2k_0a/s$  est alors de l'ordre de l'unité ou plus. Dans ce cas, l'équation (4.11) nous indique que l'amplitude de  $f^{(n)}(\tilde{t}_+)$  décroît comme

$$f^{(n)}(\tilde{t}_+) \sim \left( 1 + \frac{2k_0a}{s} \right)^{-(s+n+1)}. \quad (4.15)$$

Puisque  $s \gg 1$ , on retrouve à nouveau  $f^{(n)}(\tilde{t}_+) \approx 0$ . En somme, lorsque  $k_0a \gg 1$  et  $s \gg 1$ , la composante contre-propageante décrite par  $f^{(n)}(\tilde{t}_+)$  peut être négligée.

Tournons nous maintenant vers la composante propageante  $f^{(n)}(\tilde{t}_-)$  :

$$f^{(n)}(\tilde{t}_-) \approx (i\omega_0)^n e^{-i\phi_0} \left[ 1 - \frac{i\omega_0}{s} \left( t - \frac{z}{c} - \frac{r^2}{2c(z+ia)} \right) \right]^{-(s+n+1)}. \quad (4.16)$$

En effectuant la même approximation que celle qui nous a mené à l'équation (4.13), on obtient :

$$f^{(n)}(\tilde{t}_-) \approx (i\omega_0)^n e^{-i\phi_0} \exp \left[ i\omega_0 \left( t - \frac{z}{c} - \frac{r^2}{2c(z+ia)} \right) - \frac{\omega_0^2}{2s} \left( t - \frac{z}{c} - \frac{r^2}{2c(z+ia)} \right)^2 \right]. \quad (4.17)$$

En ne conservant que le terme dominant de la parenthèse au carré, on obtient finalement :

$$f^{(n)}(\tilde{t}_-) \approx (i\omega_0)^n \exp \left[ i(\omega_0 t - k_0 z - \phi_0) - \frac{ik_0 r^2}{2(z+ia)} - \frac{(\omega_0 t - k_0 z)^2}{2s} \right]. \quad (4.18)$$

Revenons maintenant à l'expression pour  $E_z$ . Comme on vient de le voir, on peut approximer que  $G_{\pm}^{(n)} \approx f^{(n)}(\tilde{t}_-)$ , où l'expression (4.18) est utilisée pour approximer  $f^{(n)}(\tilde{t}_-)$ . En utilisant les approximations  $\tilde{R} \approx z + ia$ ,  $\cos \tilde{\theta} \approx 1$ ,  $\sin \tilde{\theta} \approx r/(z + ia)$  et après avoir effectué quelques manipulations algébriques simples, on peut écrire  $E_z$  sous la forme

$$E_z(\mathbf{r}, t) \approx \frac{k_0 \Psi_0}{(z + ia)^2} \left[ 2i + \frac{2}{k_0 a(z/a + i)} + \frac{k_0 r^2}{(z + ia)} \right] e^{-ik_0 r^2/2(z+ia)} e^{-(\omega_0 t - k_0 z)^2/2s} e^{i(\omega_0 t - k_0 z - \phi_0)}. \quad (4.19)$$

Puisque  $k_0 a \gg 1$ , on peut négliger second terme entre crochets, et on obtient finalement

$$E_z(\mathbf{r}, t) \approx \frac{2ik_0 \Psi_0}{(z + ia)^2} \left[ 1 - \frac{ik_0 r^2}{2(z + ia)} \right] e^{-ik_0 r^2/2(z+ia)} e^{-(\omega_0 t - k_0 z)^2/2s} e^{i(\omega_0 t - k_0 z - \phi_0)}. \quad (4.20)$$

Lorsque  $k_0 a \gg 1$  et  $s \gg 1$ , on retrouve ainsi la forme de la composante  $z$  de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  paraxiale avec enveloppe gaussienne [voir équation (2.58)], pour laquelle

$$z_R \rightarrow a \quad \text{et} \quad T \rightarrow \frac{\sqrt{2s}}{\omega_0}. \quad (4.21)$$

En utilisant la même procédure, il est possible de démontrer la même correspondance pour les composantes  $E_r$  et  $B_\phi$ . La figure 4.5 illustre le champ  $E_z$  issu de la solution exacte ainsi que celui issu de la solution paraxiale avec enveloppe gaussienne pour différentes combinaisons des paramètres  $k_0 a$  et  $s$ .

En somme, la solution exacte du champ électromagnétique de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  issue du modèle des sources/puits ponctuels complexes permet d'assurer la continuité entre le régime des impulsions ultrabrèves et non paraxiales et le régime paraxial à impulsions gaussiennes précédemment étudié dans la littérature. À la section §5.8, cette analyse est poussée un peu plus loin ; on y effectue un développement en série de perturbations afin d'obtenir une expression des premières corrections non paraxiales à l'ordre paraxial fondamental. Cette analyse est toutefois limitée au cas monochromatique  $s \rightarrow \infty$ . La réalisation d'une analyse perturbative en régime pulsé s'avère beaucoup plus compliquée sur le plan algébrique [179].

## 4.9 Complément II : Indépendance sur la longueur d'onde

Dans ce complément, on démontre que dans le cas paraxial comme dans le cas exact, la dynamique d'une charge test dans le champ électromagnétique de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  est indépendante de la longueur d'onde  $\lambda_0$ .

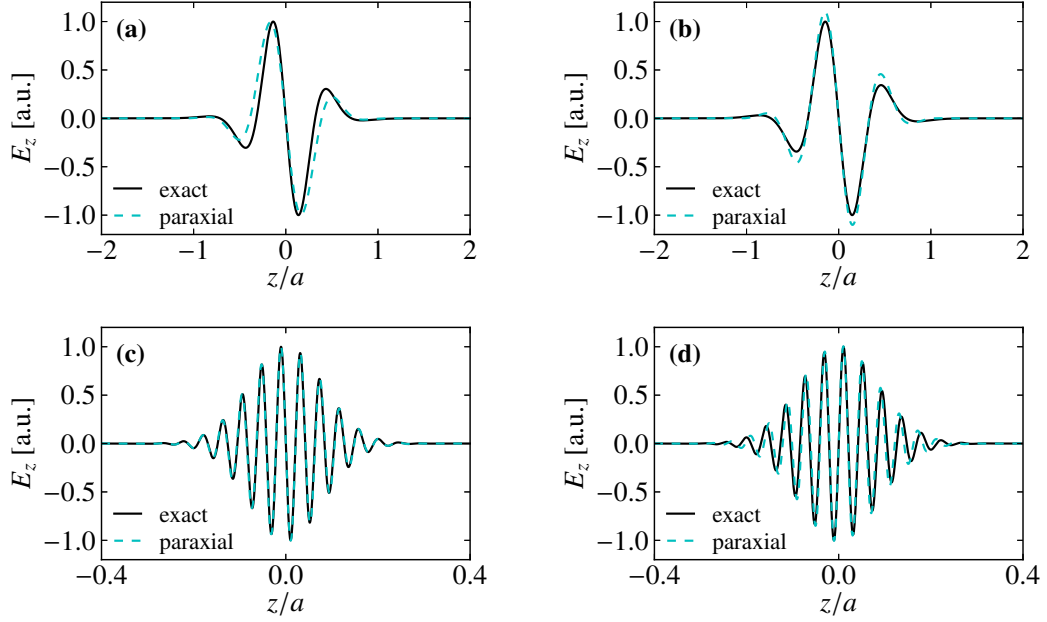


Figure 4.5 – Comparaison entre le champ électromagnétique de l’impulsion  $\text{TM}_{01}$  issu de la solution exacte et celui issu de la solution paraxiale avec enveloppe gaussienne. La composante longitudinale  $E_z$  est illustrée pour (a)–(b)  $k_0a = 10$  et  $s = 10$ , et (c)–(d)  $k_0a = 150$  et  $s = 150$ . Les figures (a) et (c) ont été obtenues à  $r = 0$  et  $t = 0$  (sur l’axe), tandis que les figures (b) et (d) ont été obtenues à  $r = a/3$  et  $t = 0$  (hors axe). Les paramètres  $z_R = a$  et  $T = \sqrt{2s}/\omega_0$  ont été utilisés dans les deux cas lors du calcul du champ paraxial.

On s’intéresse en premier lieu au cas paraxial avec enveloppe gaussienne. On définit les coordonnées et quantités sans dimension suivantes :

$$\rho \equiv \frac{r}{z_R} \quad , \quad \zeta \equiv \frac{z}{z_R} \quad , \quad \beta = \frac{\mathbf{v}}{c} \quad , \quad \tau \equiv \omega_0 t \quad , \quad \kappa_R \equiv k_0 z_R \quad , \quad \xi_T \equiv \omega_0 T \quad . \quad (4.22)$$

À l’aide de ces définitions, on peut adimensionaliser les équations du mouvement (2.92)–(2.95) :

$$\frac{d\rho}{d\tau} = \frac{\beta_r}{\kappa_R} \quad , \quad \frac{d\phi}{d\tau} = \frac{\beta_\phi}{\kappa_R \rho} \quad , \quad \frac{d\zeta}{d\tau} = \frac{\beta_z}{\kappa_R} \quad , \quad (4.23)$$

$$\frac{d\beta_r}{d\tau} = \frac{-e}{\gamma m_e c^2} \left[ (1 - \beta_r^2) \frac{E_r}{k_0} - \beta_r \beta_z \frac{E_z}{k_0} - c \beta_z \frac{B_\phi}{k_0} \right] \quad , \quad (4.24)$$

$$\frac{d\beta_\phi}{d\tau} = \frac{e}{\gamma m_e c^2} \left[ \beta_r \beta_\phi \frac{E_r}{k_0} + \beta_z \beta_\phi \frac{E_z}{k_0} \right] \quad , \quad (4.25)$$

$$\frac{d\beta_z}{d\tau} = \frac{-e}{\gamma m_e c^2} \left[ (1 - \beta_z^2) \frac{E_z}{k_0} - \beta_r \beta_z \frac{E_r}{k_0} + c \beta_r \frac{B_\phi}{k_0} \right] \quad . \quad (4.26)$$

Par ailleurs, en utilisant les définitions (4.22), les trois composantes non nulles du champ électromagnétique s’écrivent :

$$E_r(\rho, \zeta, \tau) = -\sqrt{\frac{\eta_0 P}{\pi}} \frac{k_0}{(\zeta + i)^2} \rho \exp \left[ -\frac{i\kappa_R \rho^2}{2(\zeta + i)} \right] \exp \left( -\frac{(\tau - \kappa_R \zeta)^2}{\xi_T^2} \right) e^{i(\tau - \kappa_R \zeta - \phi_0)} = c B_\phi(\rho, \zeta, \tau) \quad , \quad (4.27)$$

$$E_z(\rho, \zeta, \tau) = \sqrt{\frac{\eta_0 P}{\pi}} \frac{2ik_0}{\kappa_R(\zeta + i)^2} \left[ 1 - \frac{i\kappa_R \rho^2}{2(\zeta + i)} \right] \exp \left[ -\frac{i\kappa_R \rho^2}{2(\zeta + i)} \right] \exp \left( -\frac{(\tau - \kappa_R \zeta)^2}{\xi_T^2} \right) e^{i(\tau - \kappa_R \zeta - \phi_0)}, \quad (4.28)$$

où nous avons utilisé l'expression de la puissance  $P = \pi k_0^4 \Psi_0^2 / 2\eta_0 \kappa_R^2$  pour substituer le facteur d'amplitude  $\Psi_0$ . On peut ainsi voir que les composantes du champ ne dépendent que des coordonnées sans dimension  $(\rho, \zeta, \tau)$  et des paramètres  $(P, \kappa_R, \xi_T, \phi_0)$  à l'exception d'un facteur  $k_0$  au numérateur, qui assure une dépendance explicite à la longueur d'onde. Toutefois, les composantes du champ n'apparaissent que sous la forme  $E_r/k_0$ ,  $E_z/k_0$  et  $B_\phi/k_0$  dans les équations du mouvement (4.23)–(4.26). Par conséquent, pour une même valeur des paramètres  $(P, \kappa_R, \xi_T, \phi_0)$ , la dynamique en coordonnées sans dimension est totalement indépendante de la longueur d'onde  $\lambda_0$ .

La même chose peut être démontrée avec la solution exacte de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$ . Dans ce cas, nous utilisons les coordonnées et paramètres sans dimension suivants :

$$\rho \equiv \frac{r}{a}, \quad \zeta \equiv \frac{z}{a}, \quad \beta = \frac{\mathbf{v}}{c}, \quad \tilde{\mathcal{R}} \equiv [\rho^2 + (\zeta + i)^2]^{1/2}, \quad \tau \equiv \omega_0 t, \quad \kappa_R \equiv k_0 a, \quad (4.29)$$

en plus du paramètre  $s$  qui apparaît déjà dans la solution. Le champ électromagnétique s'écrit alors

$$E_r(\mathbf{r}, t) = \frac{3k_0^3 \Psi_0 \sin \tilde{\theta} \cos \tilde{\theta}}{\kappa_R^3 \tilde{\mathcal{R}}} \left( \frac{\mathcal{G}_-^{(0)}}{\tilde{\mathcal{R}}^2} + \frac{\mathcal{G}_+^{(1)}}{\tilde{\mathcal{R}}} + \frac{\mathcal{G}_-^{(2)}}{3} \right), \quad (4.30)$$

$$E_z(\mathbf{r}, t) = \frac{k_0^3 \Psi_0}{\kappa_R^3 \tilde{\mathcal{R}}} \left[ \frac{(3 \cos^2 \tilde{\theta} - 1)}{\tilde{\mathcal{R}}} \left( \frac{\mathcal{G}_-^{(0)}}{\tilde{\mathcal{R}}} + \mathcal{G}_+^{(1)} \right) - \sin^2 \tilde{\theta} \mathcal{G}_-^{(2)} \right], \quad (4.31)$$

$$B_\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{k_0^3 \Psi_0 \sin \tilde{\theta}}{c \kappa_R^3 \tilde{\mathcal{R}}} \left( \frac{\mathcal{G}_-^{(1)}}{\tilde{\mathcal{R}}} + \mathcal{G}_+^{(2)} \right), \quad (4.32)$$

$$g^{(n)}(\tau) = e^{-i\phi_0} \frac{\Gamma(s + n + 1)}{\Gamma(s + 1)} \left( \frac{i\kappa_R}{s} \right)^n \left( 1 - \frac{i\tau}{s} \right)^{-(s+n+1)}, \quad (4.33)$$

où  $\cos \tilde{\theta} = (\zeta + i)/\tilde{\mathcal{R}}$ ,  $\sin \tilde{\theta} = \rho/\tilde{\mathcal{R}}$ ,  $\mathcal{G}_\pm^{(n)} = g^{(n)}(\tilde{\tau}_-) \pm g^{(n)}(\tilde{\tau}_+)$  avec  $\tilde{\tau}_\pm = \tau \pm \kappa_R \tilde{\mathcal{R}} + i\kappa_R$ . Bien qu'il n'existe pas de solution analytique pour la puissance de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  exacte, il peut être facilement démontré que celle-ci s'exprime comme  $P = k_0^4 \Psi_0^2 C(\kappa_R, s)$ , où  $C(\kappa_R, s)$  est une quantité qui ne dépend que des paramètres  $\kappa_R$  et  $s$ . Par conséquent, on peut remplacer  $k_0^2 \Psi_0$  par  $[P/C(\kappa_R, s)]^{1/2}$  dans les expressions (4.30)–(4.32). De manière similaire au cas paraxial, les champs électrique et magnétique peuvent alors s'exprimer sous la forme  $\mathbf{E} = k_0 \mathcal{E}$  et  $\mathbf{B} = k_0 \mathcal{B}$ , où  $\mathcal{E}$  et  $\mathcal{B}$  sont des quantités qui ne dépendent que des paramètres  $(P, \kappa_R, s, \phi_0)$  ainsi que des coordonnées sans dimension. Ainsi, la dynamique en coordonnées sans dimension est encore une fois indépendante de la longueur d'onde.

En somme, dans le cas exact comme dans le cas paraxial, la dynamique d'un électron dans le champ de l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  est déterminée par quatre paramètres : un paramètre de phase ( $\phi_0$ ), un paramètre de durée ( $T$  ou  $s$ ), un paramètre de focalisation ( $k_0 z_R$  ou  $k_0 a$ ) et la puissance  $P$ . Notons que cette analyse n'est valide que pour une charge test. Dans une situation où il y a plusieurs particules chargées qui s'influencent mutuellement, les dimensions physiques réelles jouent un rôle important ; la dynamique dépend dans ce cas de la longueur d'onde. Par ailleurs, comme nous l'avons vu au chapitre 3, la longueur d'onde a également une influence lors du calcul des probabilités d'ionisation.

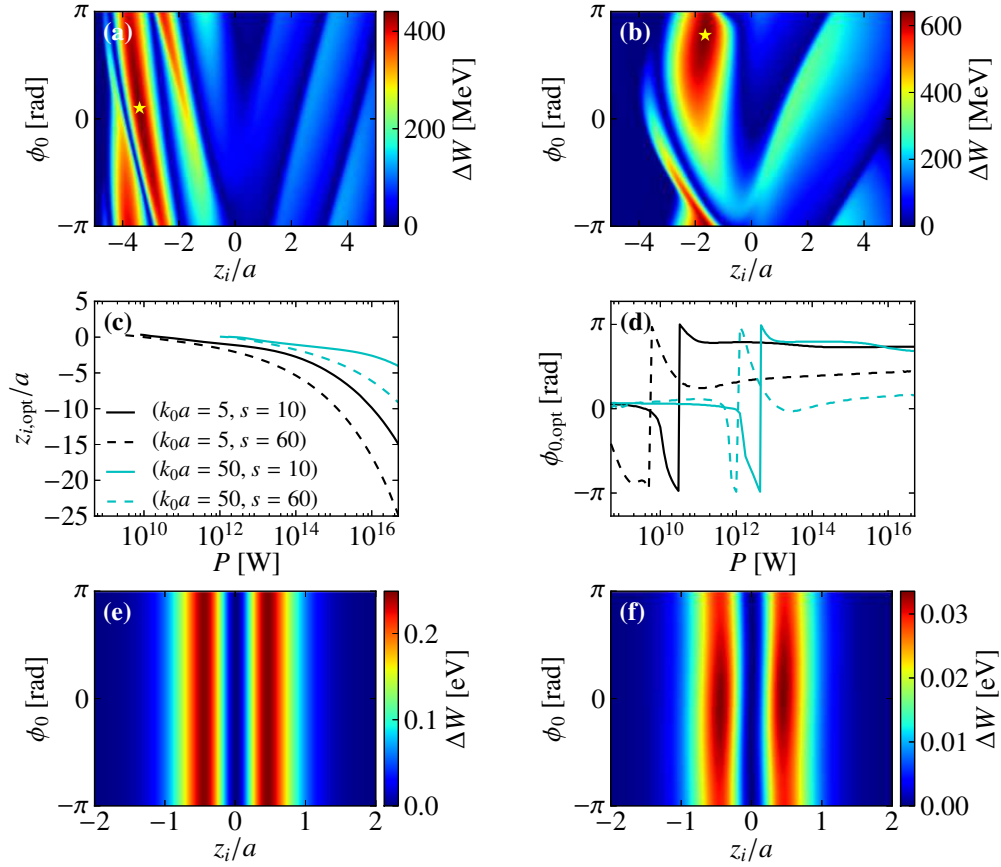


Figure 4.6 – Optimisation du gain en énergie de l'électron en fonction de sa position initiale sur l'axe optique  $z_i$  et de la phase de l'impulsion laser  $\phi_0$ . (a) Gain en énergie en fonction de  $z_i$  et  $\phi_0$  pour  $k_0a = 50$ ,  $s = 60$  et  $P = 10^{15}$  W. (b) Gain en énergie en fonction de  $z_i$  et  $\phi_0$  pour  $k_0a = 50$ ,  $s = 10$  et  $P = 10^{15}$  W. Sur les figures (a) et (b), la configuration menant au gain en énergie maximal est indiquée par une étoile. (c) Position optimale de l'électron sur l'axe optique et (d) phase optimale de l'impulsion en fonction de la puissance laser pour différentes combinaisons des paramètres  $k_0a$  et  $s$ . (e) Gain en énergie en fonction de  $z_i$  et  $\phi_0$  pour  $k_0a = 50$ ,  $s = 60$  et  $P = 10^{10}$  W. (f) Gain en énergie en fonction de  $z_i$  et  $\phi_0$  pour  $k_0a = 50$ ,  $s = 10$  et  $P = 10^{10}$  W.

#### 4.10 Complément III : Optimisation du gain en énergie

En régime ultra-relativiste, le gain en énergie d'un électron dépend fortement de sa position initiale sur l'axe optique, dénotée  $z_i$ , ainsi que de la phase de l'impulsion laser  $\phi_0$ . En effet, ces deux paramètres déterminent ultimement à quel endroit et avec quelle configuration l'électron entrera dans son cycle d'accélération final. Afin d'obtenir le gain en énergie maximal pour une même combinaison des paramètres  $P$ ,  $k_0a$  et  $s$ , il est ainsi nécessaire d'optimiser le gain dans l'espace  $(z_i, \phi_0)$ .

Les figures 4.6(a)–(b) illustrent le gain en énergie d'un électron en régime ultra-relativiste dans le plan  $(z_i, \phi_0)$ . On pourrait intuitivement croire que la position optimale de l'électron sur l'axe optique devrait se situer près du plan focal, étant donné que l'impulsion laser y atteint son amplitude maximale (voir par exemple [48]). Les simulations numériques montrent toutefois qu'il est plutôt avantageux pour

l'électron, en régime ultra-relativiste, d'être initialement positionné derrière le plan focal [voir figure 4.6(c)]. De cette manière, les premiers cycles d'accélération et de décélération amènent l'électron à proximité du plan focal, et il peut ainsi entrer dans son cycle d'accélération ultime plus près du foyer. Pour cette raison, il peut être observé que plus la puissance laser est élevée, plus la position initiale optimale de l'électron est loin derrière le plan de l'étranglement. Également, plus l'impulsion est longue, plus la position initiale optimale est éloignée du foyer.

La dépendance du gain en énergie sur la phase est assez complexe, et il est difficile de prédire la valeur de  $\phi_0$  qui maximise la valeur de  $\Delta W$  [voir figure 4.6(d)]. Notons qu'à plus faible puissance, c'est-à-dire lorsque l'accélération sous-cycle est négligeable, le gain en énergie de l'électron devient indépendant de la phase [voir figure 4.6(e)]. Cette observation, qui est en accord avec l'interprétation de la dynamique en terme de la force pondéromotrice (indépendante de  $\phi_0$ ), n'est cependant pas tout à fait reproduite pour les impulsions ultrabrèves ; une petite variation de  $\Delta W$  en fonction de la phase peut être observée à la figure 4.6(f).

Afin d'optimiser numériquement le gain en énergie dans l'espace  $(z_i, \phi_0)$ , une approche par force brute a été utilisée. On obtient en premier lieu une cartographie à moyens grains du gain en énergie dans l'espace  $(z_i, \phi_0)$ . Une fois la position approximative du maximum déterminée, une procédure de raffinage est appliquée afin d'augmenter la précision sur la position et la valeur de  $\Delta W_{\max}$ . Notons qu'une méthode d'optimisation continue plus efficace, comme la méthode du recuit simulé [131], aurait pu être utilisée afin d'améliorer l'efficacité de la recherche de  $\Delta W_{\max}$ . Pour les besoins de la présente étude, la méthode brute s'est avérée toutefois suffisante.

Mentionnons finalement que c'est dans cette étape d'optimisation du gain en énergie que l'efficacité numérique de la solution exacte issue de la méthode d'April peut être appréciée. En effet, optimiser le gain en énergie dans l'espace  $(z_i, \phi_0)$  et ce pour différentes combinaisons des paramètres  $P$ ,  $k_0a$  et  $s$  nécessite le calcul d'un nombre considérable de trajectoires. Avoir une solution numériquement efficace pour le champ électromagnétique facilite ainsi l'exploration de cet espace de paramètres extrêmement vaste.

## 4.11 Complément IV : Régimes d'accélération

Comme nous l'avons vu à la section §2.4.1, on distingue généralement trois régimes d'accélération : le régime non relativiste, le régime relativiste, et le régime ultra-relativiste. Il est intéressant d'utiliser les résultats obtenus à la figure 4.2(b) afin d'illustrer la transition entre ces trois régimes. Une partie de cette petite analyse a été présentée pour la première fois dans un article de revue que nous avons publié en 2013 dans la revue *Applied Sciences* [175].

À la figure 4.7, nous avons reproduit les courbes présentées à la figure 4.2(b) pour les combinaisons de paramètres  $k_0a = 124$ ,  $s = 155$  et  $k_0a = 50$ ,  $s = 1$ . La figure 4.2(a), qui correspond au régime des impulsions paraxiales de quelques cycles optiques, permet très bien de distinguer les trois régimes



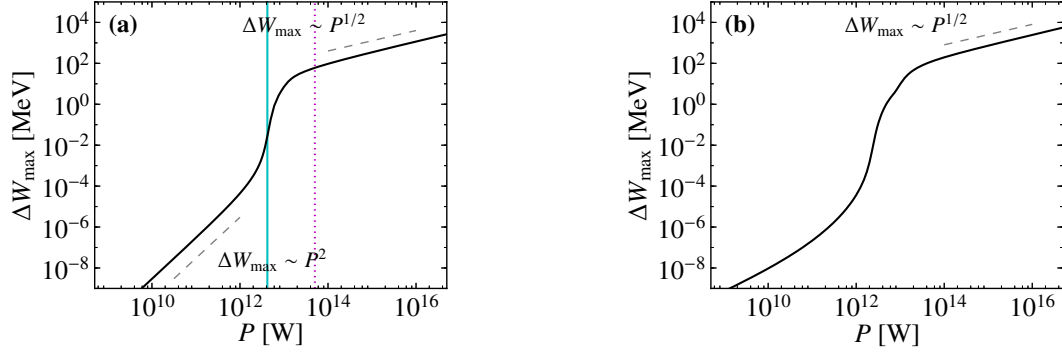


Figure 4.7 – Illustration de la transition entre les régimes non relativiste, relativiste et ultra-relativiste à l’aide des données présentées à la figure 4.2(b). Les courbes correspondent aux cas (a)  $k_0 a = 124$ ,  $s = 155$  et (b)  $k_0 a = 50$ ,  $s = 1$ . La ligne verticale continue sur la figure (a) correspond à la puissance  $P_{\text{seuil}}$ , pour laquelle  $a_z^2(z = 0) = 1$ . La ligne verticale pointillée correspond à la puissance  $P_{\text{ultra}}$ , pour laquelle  $a_z^2(z = \Delta z_{\text{dph}}) = 1$ .

distincts d’accélération.

En régime non relativiste, le gain en énergie de l’électron est très faible. Il peut être observé que celui-ci croît avec le carré de la puissance de l’impulsion laser,  $\Delta W_{\text{max}} \sim P^2$ . Ceci peut s’expliquer par l’effet de la force pondéromotrice. Comme nous l’avons vu à la section 2.4.1, la dynamique moyennée dans le temps d’une charge libre dans un champ électrique de faible intensité peut être décrite par la force pondéromotrice,

$$\frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = -\frac{e^2}{4m_e^2 \omega_0^2} \nabla |\mathbf{E}|^2. \quad (4.34)$$

On voit ainsi que la vitesse, significativement inférieure à  $c$  en régime non relativiste, devrait être proportionnelle à la puissance. Ainsi le gain en énergie est proportionnel à la puissance au carré. Notons que cet argument n’est valide que pour des impulsions dont la durée est d’au moins quelques cycles optiques. En effet, pour des impulsions très courtes, l’analyse en terme de la force pondéromotrice, qui correspond à un moyenne temporelle sur plusieurs cycles optiques, perd tout son sens. C’est probablement pour cette raison que la relation  $\Delta W_{\text{max}} \sim P^2$  ne peut être observée sur la figure 4.7(b), qui correspond au cas d’une impulsion ultrabrève.

Au fur et à mesure que la puissance augmente, l’accélération sous-cycle débute et le gain en énergie subit une augmentation rapide. On est alors en régime relativiste. À puissance encore plus élevée, le gain en énergie subit un effet de saturation et sa croissance tend vers la loi d’échelle  $\Delta W_{\text{max}} \sim P^{1/2}$ . On entre alors en régime ultra-relativiste. Dans ce régime, l’électron se déplace à la vitesse  $c$ , en phase avec l’impulsion laser. Son gain en énergie est alors directement proportionnel à l’amplitude du champ électrique, et par conséquent à la racine carrée de la puissance :

$$\Delta W \sim \int E_z(r = 0, t = z/c) dz \sim P^{1/2}. \quad (4.35)$$

En d'autres mots, le gain en énergie maximal tend vers une fraction constante de la limite théorique du gain en énergie (2.101). Ceci est valide peu importe la durée de l'impulsion laser. C'est d'ailleurs ce qui est observé à la figure 4.2(a). La fraction maximale du gain en énergie limite que l'électron peut atteindre dépend de la position à partir de laquelle il parvient à entrer dans son cycle d'accélération final et de la proximité du maximum de l'enveloppe du champ électrique qu'il atteint.

Dans le cas paraxial, il est possible d'obtenir analytiquement une estimation de la position des transitions entre les trois régimes. Il est généralement reconnu que la transition entre le régime non relativiste et le régime relativiste correspond à la puissance pour laquelle le paramètre  $a_z^2(z = 0) = 1$ , où  $a_z$  est défini à l'équation (2.98) [175, 180, 186]. Ceci correspond à la valeur  $P_{\text{seuil}}$  donnée à l'équation (2.99). Dans la littérature, on ne retrouve toutefois pas d'estimation de la puissance requise pour entrer en régime ultra-relativiste. Afin d'estimer la position de la transition, on peut supposer que la dynamique opère en régime ultra-relativiste lorsque l'amplitude de l'impulsion laser est encore suffisante pour accélérer l'électron à la vitesse de la lumière après un cycle d'accélération et décélération, qui se produit sur une distance  $\Delta z_{\text{dph}}$  près de l'origine. La puissance  $P_{\text{ultra}}$  requise pour entrer en régime ultra-relativiste correspond alors à la puissance pour laquelle  $a_z^2(z = \Delta z_{\text{dph}}) = 1$ . En supposant que  $\Delta z_{\text{dph}} = \pi z_R/2$  [voir équation (2.100)], on trouve alors, dans le cas paraxial :

$$P_{\text{ultra}} = \left(1 + \frac{\pi^2}{4}\right)^2 P_{\text{seuil}} . \quad (4.36)$$

Les puissances  $P_{\text{seuil}}$  et  $P_{\text{ultra}}$  sont illustrées à la figure 4.7(a), qui correspond au régime paraxial.

## 4.12 Complément V : Accélération contra-directionnelle

Dans le dernier complément de ce chapitre, nous abordons un aspect assez curieux de l'accélération d'électrons en régime d'impulsions ultrabrèves et non paraxiales.

Tel que décrit dans la section §2.3.3, l'impulsion  $\text{TM}_{01}$  est constituée de deux composantes principales qui se propagent dans des directions opposées. Il s'agit d'une propriété héritée du modèle des source/puits ponctuels complexes qui peut être interprétée physiquement par un schéma de focalisation sur un angle solide supérieur à  $2\pi$  stéradians. Dans le contexte de l'accélération d'électrons, on peut ainsi légitimement se demander si l'amplitude de la composante contrepropageante est suffisante pour accélérer des électrons vers l'arrière.

Dans le régime des impulsions hautement non paraxiales ( $k_0 a \sim 1$ ), une analyse attentive de la dynamique en fonction des paramètres  $z_i$  et  $\phi_0$  révèle l'existence de deux types d'accélération [voir figure 4.8(a)]. Dans le premier type, que nous connaissons bien maintenant, l'électron est accéléré vers l'axe  $z$  positif (accélération avant) et peut atteindre une énergie élevée si les paramètres sont tels que sa trajectoire est synchronisée avec un demi-cycle négatif de la composante  $E_z$  de l'impulsion qui se propage vers  $+z$ . Dans le second type, l'électron est accéléré vers l'axe  $z$  négatif (accélération arrière). Dans ce cas, il peut subir de manière similaire une accélération sous-cycle par la composante de l'impulsion qui se propage vers  $-z$ . Le gain en énergie maximal  $\Delta W_{\text{max}}$  obtenu après optimisation sur  $z_i$  et

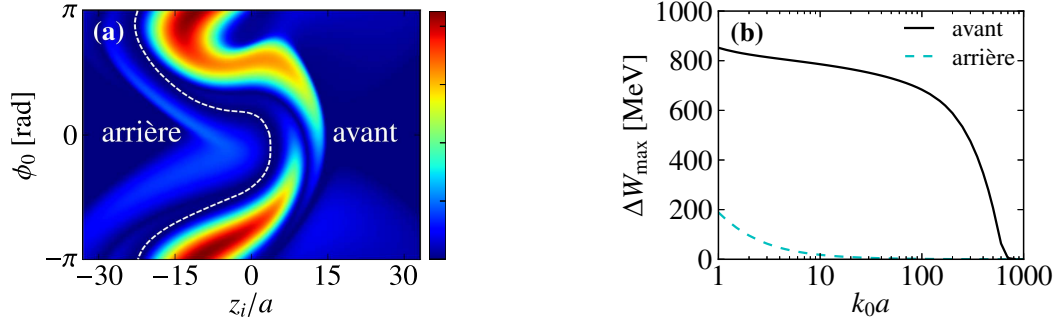


Figure 4.8 – Accélération d’électrons contra-directionnelle. (a) Gain en énergie d’un électron en fonction de sa position initiale  $z_i$  et de la phase  $\phi_0$  d’une impulsion avec  $k_0a = 1$ ,  $s = 1$  et  $P = 10^{15}$  W. La ligne pointillée délimite les régions où l’électron est accéléré vers l’avant ou vers l’arrière. (b) Gain en énergie maximal d’un électron accéléré vers l’avant et vers l’arrière en fonction du paramètre  $k_0a$  pour une impulsion avec  $s = 1$  et  $P = 10^{15}$  W. La figure (a) est reproduite d’après un acte de colloque que nous avons publié en 2013 [104].

$\phi_0$  est illustré à la figure 4.8(b) en fonction du paramètre  $k_0a$ . Notons qu’une accélération vers l’arrière non négligeable n’a lieu que dans des conditions de très forte focalisation. Cela s’explique par le fait que l’amplitude de la composante de l’impulsion qui se propage vers  $-z$  diminue très rapidement avec une augmentation de  $k_0a$ .

En utilisant un système de focalisation à grande ouverture et un nuage d’électrons initialement positionné de part et d’autre de la frontière entre les deux types d’accélération, il serait ainsi théoriquement possible de produire des impulsions d’électrons contre-propageantes et synchronisées. Bien qu’il s’agisse à première vue d’une simple curiosité, la possibilité de générer des impulsions d’électrons relativistes synchronisées pourrait peut-être un jour trouver une application dans le contexte d’expériences pompe-sonde. En effet, comme il n’existe pas de manière simple de séparer un faisceau d’électrons en deux (il n’existe pas d’*electron beam splitter*), cette méthode pourrait peut-être s’avérer d’une certaine utilité pour la production de faisceaux d’électrons synchronisés.



## Chapitre 5

# Validité de l'approximation paraxiale

Article original :

**Validity of the paraxial approximation for electron acceleration  
with radially polarized laser beams**

Vincent Marceau<sup>1</sup>, Charles Varin<sup>2</sup> et Michel Piché<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centre d'Optique, Photonique et Laser, Université Laval, Québec, Québec, Canada.

<sup>2</sup>Center for Research in Photonics, University of Ottawa, Ottawa, Ontario, Canada.

Référence : Optics Letters 38, 821–823 (2013).

© 2013 The Optical Society of America (§5.2–§5.7)

## 5.1 Avant-propos

Au chapitre précédent, nous avons examiné la dynamique à une dimension d'un électron soumis au champ électromagnétique d'une impulsion  $TM_{01}$ . Nous passons maintenant à un cas légèrement plus complexe, soit celui d'un électron initialement hors axe. Puisque qu'un électron initialement au repos n'acquiert aucune vitesse azimutale lorsqu'il interagit avec une impulsion  $TM_{01}$ , il s'agit d'une dynamique à deux dimensions.

Contrairement au chapitre précédent, nous nous concentrons dans ce chapitre sur des conditions de focalisation plus modérée. Plus spécifiquement, nous questionnons la validité de l'approximation paraxiale lors de la modélisation de l'accélération d'électrons dans des conditions soi-disant paraxiales. Nous verrons que la solution exacte n'est pas seulement utile pour étudier l'accélération en régime d'impulsions ultrabrèves et non paraxiales, mais qu'elle est également nécessaire pour modéliser correctement la dynamique ultra-relativiste à plus faible focalisation.

Ce chapitre est encore une fois divisé en deux parties. La première partie (sections §5.2 à §5.7) correspond à un article qui a été publié dans la revue *Optics Letters* en mars 2013 [107]. Elle est par conséquent rédigée en anglais, à l'exception d'une version française du résumé. Les sections §5.8 à §5.10 viennent ensuite compléter les résultats publiés dans l'article.

## 5.2 Résumé

Lors de la modélisation de l'accélération d'électrons par laser, il est coutume de travailler sous l'approximation paraxiale. Dans cette étude, nous questionnons la validité de cette approximation en simulant numériquement l'accélération d'électrons par impulsions laser de type  $TM_{01}$  à l'aide d'une solution exacte à l'équation de Helmholtz de même qu'avec sa contrepartie paraxiale. Sous des conditions de focalisation pour lesquelles l'approximation paraxiale est généralement considérée valide, nous démontrons l'existence de différences importantes entre les résultats obtenus avec le champ exact et ceux obtenus avec le champ paraxial. Nos résultats indiquent que prudence est de mise lorsque l'accélération d'électrons par impulsions laser de polarisation radiale est étudiée à l'aide de l'approximation paraxiale.

## 5.3 Abstract

In the study of laser-driven electron acceleration, it has become customary to work within the framework of paraxial wave optics. Using an exact solution to the Helmholtz equation as well as its paraxial counterpart, we perform numerical simulations of electron acceleration with a high-power  $TM_{01}$  beam. For beam waist sizes at which the paraxial approximation was previously recognized valid, we highlight significant differences in the angular divergence and energy distribution of the electron bunches produced by the exact and the paraxial solutions. Our results demonstrate that extra care has

to be taken when working under the paraxial approximation in the context of electron acceleration with radially polarized laser beams.

## 5.4 Introduction

Electron acceleration driven by high-power lasers has attracted much effort, since it could lead to the development of compact electron accelerators. Such devices are expected to be useful in many applications, ranging from coherent x-ray generation [119, 141] to electron diffraction imaging [16]. In laser-driven particle acceleration, the challenge is to find an efficient way to apply the electromagnetic field. Among the many proposed methods, the use of radially polarized laser beams for electron acceleration in vacuum has been the object of many investigations [48, 103, 138, 139, 150, 178, 179, 186]. In this scheme, which was recently demonstrated experimentally [126], electrons experience sub-cycle acceleration from the longitudinal electric field component at the center of an ultra-intense  $\text{TM}_{01}$  beam. This mechanism induces a strong longitudinal compression effect that could theoretically lead to the production of attosecond electron bunches [75, 178].

Many studies that have investigated on-axis [48, 138, 179, 186] and off-axis [150, 178] electron acceleration in radially polarized laser beams are based on the usual *paraxial approximation*. In these analyses, it is generally assumed that the paraxial approximation is valid whenever  $k_0 z_R \gtrsim 125$  (or  $w_0/\lambda_0 \gtrsim 2.5$ ), where  $z_R$  and  $w_0$  are respectively the Rayleigh range and beam waist size, and  $\lambda_0 = 2\pi/k_0$  is the dominant wavelength of the laser.

In this Letter, we question the validity of the paraxial approximation in the above-mentioned parameter regime. Using a rigorous solution to Helmholtz equation for a  $\text{TM}_{01}$  beam as well as its paraxial counterpart, we highlight significant differences in the electron acceleration dynamics predicted by the exact and the paraxial fields. The exact fields are used to investigate the origin of these differences.

## 5.5 From exact to paraxial $\text{TM}_{01}$ beams

A nonparaxial cw  $\text{TM}_{01}$  beam propagating along the positive  $z$  axis with its beam waist at  $z = 0$  is described in complex notation (i.e.,  $E = \text{Re}\{\tilde{E}e^{i(\omega_0 t - \phi_0)}\}$ , where  $\omega_0 = ck_0$  and  $\phi_0$  are respectively the beam frequency and phase constant) by the following field components in cylindrical coordinates  $(r, \phi, z)$  [5, 147]:

$$\tilde{E}_r = -2ik_0^3 \Psi_0 e^{-k_0 a} \sin \tilde{\theta} \cos \tilde{\theta} j_2(k_0 \tilde{R}), \quad (5.1)$$

$$\tilde{E}_z = -\frac{4}{3} ik_0^3 \Psi_0 e^{-k_0 a} \left[ j_0(k\tilde{R}) + P_2(\cos \tilde{\theta}) j_2(k_0 \tilde{R}) \right], \quad (5.2)$$

$$\tilde{B}_\phi = \frac{2}{c} k_0^3 \Psi_0 e^{-k_0 a} \sin \tilde{\theta} j_1(k_0 \tilde{R}). \quad (5.3)$$

Here  $\Psi_0$  is an amplitude parameter,  $k_0$  is the beam wavenumber,  $\tilde{R} = [r^2 + (z + ia)^2]^{1/2}$  is the complex radius,  $\cos \tilde{\theta} = (z + ia)/\tilde{R}$  defines the complex angle  $\tilde{\theta}$ ,  $j_n(\cdot)$  is the  $n$ -th order spherical Bessel function

of the first kind, and  $P_2(\cdot)$  is the Legendre polynomial of degree 2. The parameter  $a$  is a real and positive constant called the confocal parameter. The latter may be used to characterize the degree of paraxiality of the beam since it is monotonically related to the Rayleigh range and beam waist size by the relation  $z_R = k_0 w_0^2/2 = [\sqrt{1 + (k_0 a)^2} - 1]/k_0$ . The power carried along the  $z$  axis by a nonparaxial  $TM_{01}$  beam is [6]

$$P = \frac{\pi k_0 e^{-2k_0 a} |\Psi_0|^2}{2\eta_0 a^3} \left[ 2k_0 a \sinh(2k_0 a) - \cosh(2k_0 a) + 1 - 2k_0^2 a^2 \right]. \quad (5.4)$$

Note that the fields described in Eqs. (5.1)–(5.3) represent a rigorous solution to Helmholtz equation. We will thus refer to them as the *exact  $TM_{01}$  fields*.

In the paraxial limit, namely when  $k_0 a \gg 1$ , the fields (5.1)–(5.3) can be expanded as power series of the parameter  $\delta = 1/k_0 a$ . Using the normalized coordinates  $\rho \equiv r(2a/k_0)^{-1/2}$  and  $\zeta \equiv z/a$  (since  $z_R = k_0 w_0^2/2 \approx a$ ), we find, up to terms of order  $\delta^3$ :

$$\tilde{E}_r = -\sqrt{2} k_0^3 \Psi_0 \left[ \rho f^2 \delta^{3/2} - \left( 3i\rho f^3 + 3\rho^3 f^4 - \frac{i}{2} \rho^5 f^5 \right) \delta^{5/2} + O(\delta^{7/2}) \right] \exp(i\varphi), \quad (5.5)$$

$$\tilde{E}_z = 2ik_0^3 \Psi_0 \left[ (f^2 - i\rho^2 f^3) \delta^2 - \left( i f^3 + 5\rho^2 f^4 - \frac{7i}{2} \rho^4 f^5 - \frac{1}{2} \rho^6 f^6 \right) \delta^3 + O(\delta^4) \right] \exp(i\varphi), \quad (5.6)$$

$$\tilde{B}_\phi = -\frac{\sqrt{2}}{c} k_0^3 \Psi_0 \left[ \rho f^2 \delta^{3/2} - \left( i\rho f^3 + 2\rho^3 f^4 - \frac{i}{2} \rho^5 f^5 \right) \delta^{5/2} + O(\delta^{7/2}) \right] \exp(i\varphi), \quad (5.7)$$

where we have defined  $f \equiv 1/(\zeta + i)$  and  $\varphi \equiv -(\zeta/\delta + \rho^2 f)$ . See Complement I in Sec. §5.8 for all the mathematical details leading to Eqs. (5.5)–(5.7). The lowest-order terms of Eqs. (5.5)–(5.7) correspond to the well-known *paraxial  $TM_{01}$  fields*, which are commonly used to analyze electron acceleration in radially polarized laser beams [48, 138, 150, 178, 179, 186],

$$\tilde{E}_r^{(0)} = -\sqrt{2} k_0^3 \Psi_0 \rho f^2 \delta^{3/2} \exp(i\varphi) = c \tilde{B}_\phi^{(0)}, \quad (5.8)$$

$$\tilde{E}_z^{(0)} = 2ik_0^3 \Psi_0 (f^2 - i\rho^2 f^3) \delta^2 \exp(i\varphi). \quad (5.9)$$

## 5.6 An ultrarelativistic case study

To simulate electron acceleration in radially polarized laser beams, we numerically integrate the Newton-Lorentz equations:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}, \quad \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{e}{\gamma m_e} \left[ \mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B} - \frac{\mathbf{v}}{c^2} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}) \right], \quad (5.10)$$

where  $e$ ,  $m_e$ ,  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{v}$  are the electron's charge, mass, position, velocity, respectively, and  $\gamma = (1 - |\mathbf{v}|^2/c^2)^{-1/2}$ . We also suppose that the laser beam is pulsed, which we model by multiplying  $\mathbf{E}$  and  $\mathbf{B}$  by  $\text{sech}(\xi/\xi_0)$ , where  $\xi = \omega_0 t - k_0 z$ . This is to ensure that the fields satisfy Maxwell's equation in the limit  $\xi_0 \gg 1$  for any value of the phase  $\xi$  [186]. Furthermore, we use  $\lambda_0 = 800$  nm, although it can be readily shown that the results are scalable to any value of  $\lambda_0$  [103, 186].



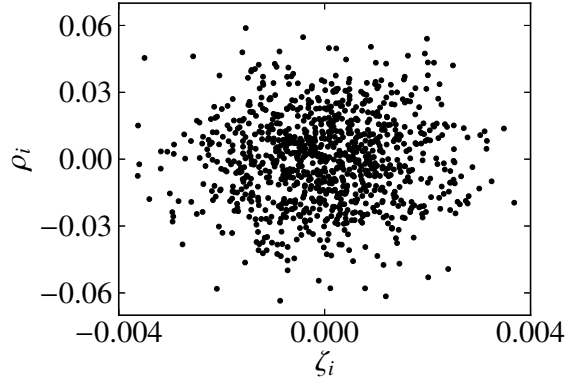


Figure 5.1 – Snapshot of the initial electron bunch. The electrons are initially at rest, and their position is drawn randomly from a two-dimensional gaussian distribution centered at the origin with standard deviation equal to  $\sigma_r = \sigma_z = \lambda_0/10$  (which corresponds to  $\sigma_\rho = 2\pi/100\sqrt{10}$  and  $\sigma_\zeta = 2\pi/5000$  in normalized coordinates).

We consider a cloud of electrons initially at rest in the  $(r, z)$  plane outside the laser pulse. The initial position of the electrons are drawn randomly from a two-dimensional Gaussian distribution centered at the origin with standard deviation  $\sigma_r = \sigma_z = \lambda_0/10$  (see Fig. 5.1). The electrons are accelerated by a pulsed  $\text{TM}_{01}$  beam with  $k_0 a = 500$  (which corresponds to  $w_0 \approx 5\lambda_0$ ), a value generally considered well inside the paraxial regime. Space-charge effects are neglected; each trajectory is computed independently. The relativistic electron bunch produced after performing the numerical simulation with the exact and the paraxial  $\text{TM}_{01}$  fields from the same initial conditions are shown in Fig. 5.2. A comparison of the data sets in Fig. 5.2(a)–(c) immediately shows an enormous difference in the bunch transverse extent; the angular divergence of the bunch accelerated by the exact fields is about 100 times larger than the bunch accelerated by the paraxial fields. Moreover, the electron bunch energy gain distribution is very different from one case to the other, as shown in Fig. 5.2(d). The average energy gain obtained with the paraxial fields is however close to the energy gain near the optical axis with the exact fields, as shown in Fig. 5.2(e) (see Complement II in Sec. §5.9). This agrees with previous results reported in [103] for on-axis acceleration. Since the near-axis electrodynamics is similar in both cases, the strong longitudinal compression predicted by the paraxial fields is also observed with the exact fields.

To understand why such important discrepancies between the exact and the paraxial cases arise for off-axis electrons, it is instructive to look at the equations of motion. When electrons close to the optical axis interact with the laser beam, they are primarily accelerated in the positive  $z$  direction by the longitudinal electric field. For an electron with  $v_r \ll v_z$ , the equation governing the radial velocity is approximately

$$\frac{dv_r}{dt} \approx \frac{-e}{\gamma m_e} (E_r - v_z B_\phi) . \quad (5.11)$$

From Eq. (5.8), we see that the paraxial  $\tilde{E}_r$  and  $\tilde{B}_\phi$  field components are perfectly symmetric, i.e.,

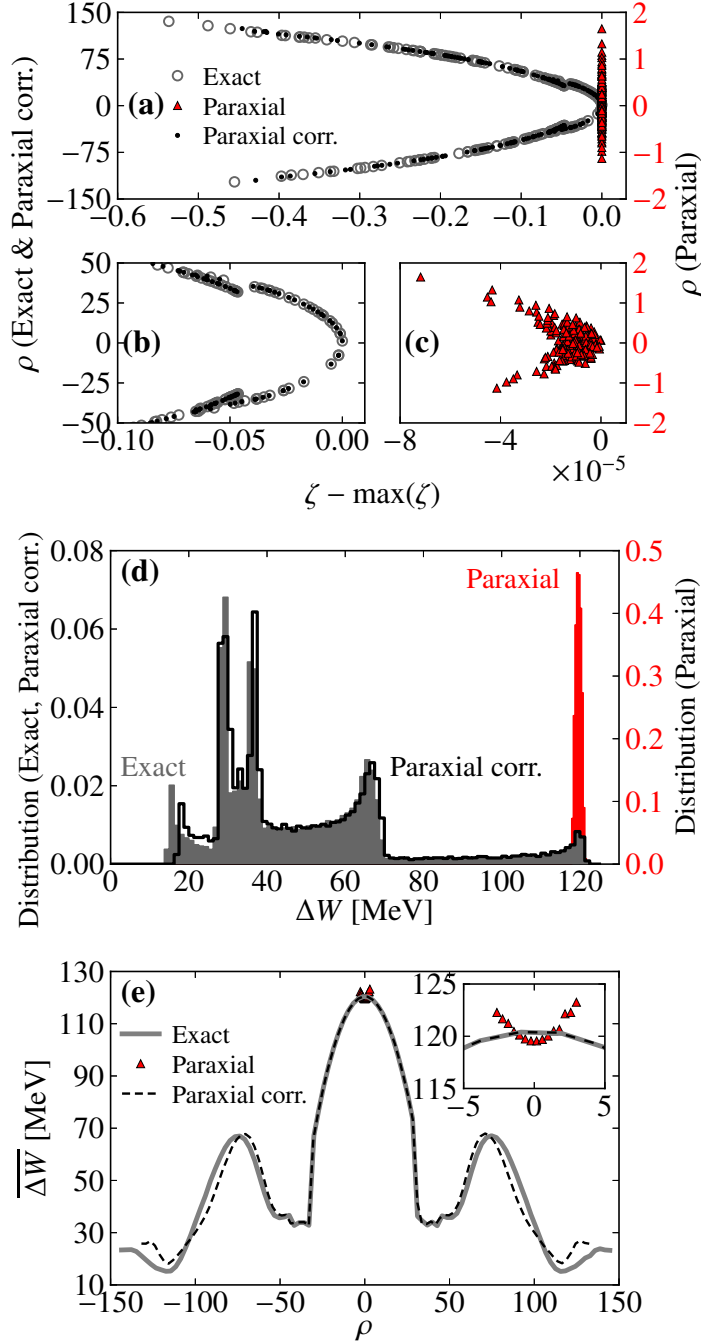


Figure 5.2 – Electron bunch accelerated by a  $TM_{01}$  pulsed beam with  $P = 10^{15}$  W,  $k_0 a = 500$ ,  $\xi_0 = 14.21$ ,  $\phi_0 = \pi$ . The simulation was performed with: (i) the exact fields [Eqs. (5.1)–(5.3)], (ii) the paraxial fields [Eqs. (5.8)–(5.9)], and (iii) the corrected paraxial fields [Eqs. (5.5)–(5.7) up to  $\mathcal{O}(\delta^3)$ ]. (a) Bunch snapshot and (b)–(c) close-up view of the front end; (d) energy gain distribution; (e) average energy gain versus final radial coordinate. The electrons are initially at rest outside the laser pulse in the  $(r, z)$  plane and distributed randomly according to a Gaussian distribution centered at the origin with  $\sigma_r = \sigma_z = \lambda_0/10$ . The results are computed 15 ps after the passage of the beam at  $z = 0$ . Only  $N = 200$  electrons are shown in (a)–(c), while  $N = 50000$  different initial conditions were used to obtain the results in (d) and (e). The on-axis bunch duration in all cases is approximately 5 as.

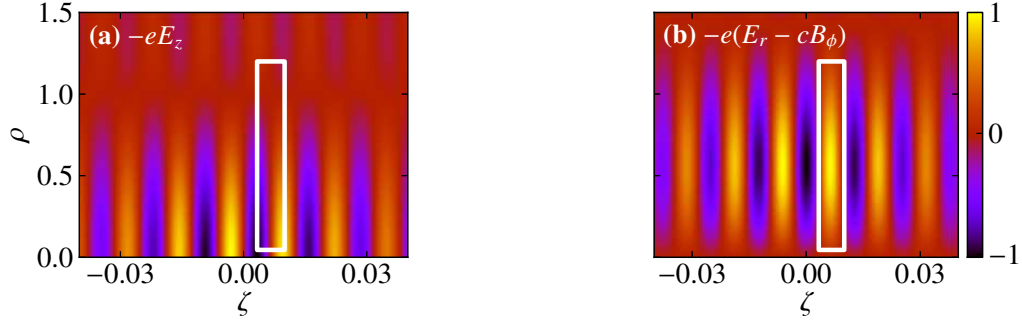


Figure 5.3 – Normalized amplitude of (a)  $-eE_z$  and (b)  $-e(E_r - cB_\phi)$  at  $t = 0$  (exact fields). During sub-cycle acceleration, electrons will spend most of their time between a maximum of  $-eE_z$  and the minimum located behind [an example is shown by the rectangle in (a) and (b)]. In this phase configuration, electrons travel at  $v_z \approx c$  and feel, according to (b), a radial force directed outward. Beam parameters are the same as in Fig. 5.2.

$\tilde{E}_r^{(0)} = c\tilde{B}_\phi^{(0)}$ . Therefore, according to Eq. (5.11), an electron travelling primarily along the optical axis at a relativistic velocity will feel a quasi-null force in the radial direction. This explains the observation of electron bunches with very narrow transverse extent when performing the simulations with the paraxial fields.

However, this argument does not hold in the exact case. According to Eqs. (5.1) and (5.3), the exact  $\tilde{E}_r$  and  $\tilde{B}_\phi$  field components are not perfectly symmetric. The perturbative series (5.5) and (5.7) show that the symmetry between  $\tilde{E}_r$  and  $\tilde{B}_\phi$  is broken as soon as the first nonparaxial correction is introduced. Since  $E_r$  and  $B_\phi$  reach their maximum value at  $\rho \approx [(1 + \zeta^2)/2]^{1/2}$ , the ratio of the maximum value of the radial field term in Eq. (5.11),  $|E_r - cB_\phi|$ , and the accelerating field,  $|E_z|$ , scales as  $\delta^{1/2}(1 + \zeta^2)^{1/2}$ . The radial force component may therefore not be neglected when  $k_0a \gtrsim 100$ , and its relative importance becomes greater as  $\zeta$  increases. Moreover, Fig. 5.3 demonstrates that the phase configuration in which electrons spend most of their time during sub-cycle acceleration is associated with a radial force directed outward. This explains why the angular divergence of the bunch accelerated by the exact solution is larger instead of smaller.

To verify explicitly if the discrepancy between the electron bunches in Fig. 5.2 originates from the artificial symmetry between the paraxial  $\tilde{E}_r^{(0)}$  and  $\tilde{B}_\phi^{(0)}$  field components, we have performed the same numerical simulation with the *corrected paraxial fields*, i.e., the paraxial fields with the first nonparaxial correction to each component [Eqs. (5.5)–(5.7) up to  $O(\delta^3)$ ]. The results obtained are shown in Fig. 5.2. We immediately see a much better agreement with the exact case. While the final positions of the electrons do not match perfectly, the spatial configuration of the bunches and their energy gain distribution are much more similar. Note that the small differences in the energy gain distribution can be understood from Fig. 5.2(e). Indeed, we see that the corrected paraxial results get less accurate as  $\rho$  increases. This is a consequence of the fact that the magnitude of the nonparaxial corrections increases as we move further from the optical axis. Taking into account the first nonparaxial correction to  $\tilde{E}_r$  and  $\tilde{B}_\phi$  thus only offers a limited solution for electrons far from the optical axis.

Despite the fact that the validity of the paraxial approximation was never fully addressed in the literature for  $k_0 z_R$  values well above 100, an order of magnitude comparison may be performed with existing results. In [75], a radially polarized laser beam with  $w_0 = 3\lambda_0$  and second-order FDTD field accuracy was used to accelerate electrons from a target of size comparable to the initial conditions used here. The resulting electron bunch angular divergence was reported to be approximately  $\Delta\theta \approx 3^\circ$ . With the parameters used in this Letter, we obtain  $\Delta\theta \approx 5^\circ$  with the exact fields, which is of the same order of magnitude as in [75], compared to  $\Delta\theta < 0.1^\circ$  for the paraxial fields.

## 5.7 Conclusion

In conclusion, in a parameter regime where the paraxial approximation was previously considered valid, we have highlighted significant differences between the properties of electron bunches accelerated by paraxial and exact  $\text{TM}_{01}$  beams. These differences originate from the symmetry between the paraxial  $\tilde{E}_r^{(0)}$  and  $\tilde{B}_\phi^{(0)}$  fields. This artificial symmetry is broken as soon as the first nonparaxial corrections to the electromagnetic field are taken into account, which allows to obtain more accurate results. The considerations presented in this Letter are also believed to apply to ultrashort pulses, since the relation  $\tilde{E}_r = c\tilde{B}_\phi$  always holds for the paraxial  $\text{TM}_{01}$  fields, regardless of the pulse duration [179]. Our study thus advocates that special care has to be taken when working under the paraxial approximation in the context of electron acceleration in radially polarized laser beams. It should be reminded that under relativistic conditions, nonparaxial field corrections may always yield major differences in the trajectories of off-axis electrons, even for very large values of  $k_0 a$  (see Complement II in Sec. §5.9). Solutions as accurate as possible, ideally exact, should thus be used.

## 5.8 Complément I : Développement en série de perturbations

Dans ce complément, nous détaillons la réalisation du développement en série de perturbations du champ monochromatique exact du faisceau  $\text{TM}_{01}$  donné aux équations (5.5)–(5.7). Ce développement a pour but d’obtenir l’expression de la première correction non paraxiale de chaque composante du champ.

Comme on s’intéresse à la limite du régime paraxial, qui correspond à la condition  $k_0 a \gg 1$ , l’analyse perturbative s’effectue naturellement en fonction d’un paramètre  $\delta$  défini comme  $\delta \equiv 1/k_0 a$ . Les coordonnées sans dimension suivantes nous seront utiles :

$$\rho \equiv r \sqrt{\frac{k_0}{2a}} \quad \text{et} \quad \zeta \equiv \frac{z}{a}. \quad (5.12)$$

Ces définitions proviennent du fait qu’en régime paraxial, on a  $z_R \approx a$  (distance de Rayleigh) et  $w_0^2 \approx 2a/k_0$  (taille à l’étranglement). Ainsi,  $\rho$  et  $\zeta$  sont, dans le cas qui nous intéresse, d’ordre  $\mathcal{O}(1)$  ou moins. Si on inverse les définitions (5.12) et qu’on les exprime en fonction de  $\delta$ , on a

$$r = \frac{\sqrt{2}}{k_0} \delta^{-1/2} \rho \quad \text{et} \quad z = \frac{1}{k_0} \delta^{-1} \zeta. \quad (5.13)$$

Analysons maintenant une à une chaque composante du champ électromagnétique.

### 5.8.1 Champ électrique radial $\tilde{E}_r$

En utilisant les définitions des fonctions de Bessel sphériques données à la section §2.3.4, le champ électrique radial  $\tilde{E}_r$ , donné à l'équation (5.1), peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\tilde{E}_r &= -2ik_0^3\Psi_0e^{-k_0a}\sin\tilde{\theta}\cos\tilde{\theta}j_2(k_0\tilde{R}) \\ &= -2ik_0^3\Psi_0e^{-k_0a}\frac{r(z+ia)}{\tilde{R}^2}\left[\left(\frac{3}{k_0^3\tilde{R}^3}-\frac{1}{k_0\tilde{R}}\right)\frac{e^{ik_0\tilde{R}}-e^{-ik_0\tilde{R}}}{2i}-\frac{3}{k_0^2\tilde{R}^2}\frac{e^{ik_0\tilde{R}}+e^{-ik_0\tilde{R}}}{2}\right] \\ &= -2ik_0^3\Psi_0e^{-k_0a}r(z+ia)\left[\left(\frac{3}{k_0^3\tilde{R}^5}-\frac{1}{k_0\tilde{R}^3}\right)\frac{e^{ik_0\tilde{R}}-e^{-ik_0\tilde{R}}}{2i}-\frac{3}{k_0^2\tilde{R}^4}\frac{e^{ik_0\tilde{R}}+e^{-ik_0\tilde{R}}}{2}\right].\end{aligned}\quad (5.14)$$

Intéressons nous d'abord aux exponentielles. On a :

$$\exp[\pm ik_0\tilde{R}] = \exp[\pm ik_0\sqrt{r^2+(z+ia)^2}] = \exp[\pm ik_0(z+ia)\sqrt{1+r^2/(z+ia)^2}]. \quad (5.15)$$

Supposons maintenant que  $|r^2/(z+ia)^2| \ll 1$ . On peut alors développer la racine carrée en série de Taylor :

$$\begin{aligned}\exp[\pm ik_0\tilde{R}] &= \exp\left[\pm ik_0(z+ia)\left(1+\frac{r^2}{2(z+ia)^2}-\frac{r^4}{8(z+ia)^4}+\dots\right)\right] \\ &\approx \exp[\mp k_0a]\exp[\pm ik_0z]\exp\left[\pm\frac{ik_0r^2}{2(z+ia)}\right]\exp\left[\mp\frac{ik_0r^4}{8(z+ia)^3}\right].\end{aligned}\quad (5.16)$$

On voit tout de suite que l'exponentielle positive  $\exp(ik_0\tilde{R})$  va diminuer exponentiellement comme  $\exp(-k_0a)$ . Elle peut donc être négligée. Physiquement, ce terme correspond à la composante du faisceau qui se propage selon l'axe  $z$  négatif. Cela peut se voir par la présence du facteur  $\exp(ik_0z)$ . L'exponentielle négative  $\exp(-ik_0\tilde{R})$  est quant à elle non négligeable et est approximée dans ce qui suit par l'expression suivante :

$$\exp[-ik_0\tilde{R}] \approx \exp[k_0a]\exp[-ik_0z]\exp\left[-\frac{ik_0r^2}{2(z+ia)}\right]\left(1+\frac{ik_0r^4}{8(z+ia)^3}\right), \quad (5.17)$$

où le développement en série de Taylor  $e^x \approx 1+x$ , valide pour  $|x| \ll 1$ , a été utilisé pour la dernière exponentielle. En utilisant ces résultats, on obtient

$$\begin{aligned}\tilde{E}_r &\approx -2ik_0^3\Psi_0r(z+ia)\left[-\frac{1}{2i}\left(\frac{3}{k_0^3\tilde{R}^5}-\frac{1}{k_0\tilde{R}^3}\right)-\frac{3}{2k_0^2\tilde{R}^4}\right]e^{-k_0a}e^{-ik_0\tilde{R}} \\ &\approx -2ik_0^3\Psi_0r(z+ia)\left[\frac{i}{2}\left(\frac{3}{k_0^3\tilde{R}^5}-\frac{1}{k_0\tilde{R}^3}\right)-\frac{3}{2k_0^2\tilde{R}^4}\right]\left(1+\frac{ik_0r^4}{8(z+ia)^3}\right)\exp\left[-ik_0z-\frac{ik_0r^2}{2(z+ia)}\right].\end{aligned}\quad (5.18)$$

On peut maintenant approximer  $\tilde{R}^{-n}$  à l'aide de son développement en série de Taylor :

$$\tilde{R}^{-n} = [r^2+(z+ia)^2]^{-n/2} \approx (z+ia)^{-n}\left[1-\frac{n}{2}\frac{r^2}{(z+ia)^2}\right]. \quad (5.19)$$

On obtient alors :

$$\begin{aligned} \tilde{E}_r \approx -2ik_0^3\Psi_0 r(z+ia) & \left[ \frac{3i}{2k_0^3(z+ia)^5} \left( 1 - \frac{5r^2}{2(z+ia)^2} \right) - \frac{i}{2k_0(z+ia)^3} \left( 1 - \frac{3r^2}{2(z+ia)^2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{3}{2k_0^2(z+ia)^4} \left( 1 - \frac{2r^2}{(z+ia)^2} \right) \right] \left( 1 + \frac{ik_0 r^4}{8(z+ia)^3} \right) \exp \left[ -ik_0 z - \frac{ik_0 r^2}{2(z+ia)} \right]. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Il est maintenant utile d'avoir recours aux coordonnées sans dimension afin de connaître l'ordre en  $\delta$  de chaque terme :

$$\begin{aligned} \tilde{E}_r \approx -2ik_0^3\Psi_0 \frac{\sqrt{2}\rho(\zeta+i)}{k_0^2\delta^{3/2}} & \left[ \frac{3ik_0^2\delta^5}{2(\zeta+i)^5} \left( 1 - \frac{5\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) - \frac{ik_0^2\delta^3}{2(\zeta+i)^3} \left( 1 - \frac{3\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{3k_0^2\delta^4}{2(\zeta+i)^4} \left( 1 - \frac{4\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) \right] \left( 1 + \frac{i\delta\rho^4}{2(\zeta+i)^3} \right) \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta+i)} \right], \\ \tilde{E}_r \approx -\sqrt{2}k_0^3\Psi_0 & \left[ -\frac{3\rho\delta^{7/2}}{(\zeta+i)^4} \left( 1 - \frac{5\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) + \frac{\rho\delta^{3/2}}{(\zeta+i)^2} \left( 1 - \frac{3\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{3i\rho\delta^{5/2}}{(\zeta+i)^3} \left( 1 - \frac{4\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) \right] \left( 1 + \frac{i\delta\rho^4}{2(\zeta+i)^3} \right) \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta+i)} \right]. \end{aligned} \quad (5.21)$$

En ne conservant que les termes des deux ordres inférieurs en  $\delta$ , soit  $O(\delta^{3/2})$  et  $O(\delta^{5/2})$ , on obtient :

$$\tilde{E}_r = -\sqrt{2}k_0^3\Psi_0 \left[ \frac{\rho\delta^{3/2}}{(\zeta+i)^2} - \left( \frac{3i\rho}{(\zeta+i)^3} + \frac{3\rho^3}{(\zeta+i)^4} - \frac{i\rho^5}{2(\zeta+i)^5} \right) \delta^{5/2} \right] \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta+i)} \right]. \quad (5.22)$$

Le premier terme, d'ordre  $O(\delta^{3/2})$ , correspond au terme paraxial, tandis que les trois autres termes, d'ordre  $O(\delta^{5/2})$ , constituent la première correction non paraxiale.

## 5.8.2 Champ électrique longitudinal $\tilde{E}_z$

La composante longitudinale du champ électrique du faisceau  $\text{TM}_{01}$  s'écrit :

$$\begin{aligned} \tilde{E}_z &= -\frac{4}{3}ik_0^3\Psi_0 e^{-k_0 a} \left[ j_0(k\tilde{R}) + P_2(\cos\tilde{\theta})j_2(k_0\tilde{R}) \right] \\ &= -\frac{4}{3}ik_0^3\Psi_0 e^{-k_0 a} \left[ \frac{\sin(k_0\tilde{R})}{k_0\tilde{R}} + \left( 1 - \frac{3}{2}\sin^2\tilde{\theta} \right) \left( \frac{3\sin(k_0\tilde{R})}{k_0^3\tilde{R}^3} - \frac{\sin(k_0\tilde{R})}{k_0\tilde{R}} - \frac{3\cos(k_0\tilde{R})}{k_0^2\tilde{R}^2} \right) \right] \\ &= -\frac{4}{3}ik_0^3\Psi_0 e^{-k_0 a} \left[ \frac{3\sin(k_0\tilde{R})}{k_0^3\tilde{R}^3} - \frac{3\cos(k_0\tilde{R})}{k_0^2\tilde{R}^2} - \frac{3}{2}r^2 \left( \frac{3\sin(k_0\tilde{R})}{k_0^3\tilde{R}^5} - \frac{\sin(k_0\tilde{R})}{k_0\tilde{R}^3} - \frac{3\cos(k_0\tilde{R})}{k_0^2\tilde{R}^4} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.23)$$

En utilisant les résultats obtenus précédemment pour le champ électrique radial, on peut approximer les fonctions  $\sin(k_0\tilde{R})$  et  $\cos(k_0\tilde{R})$  par

$$\sin(k_0\tilde{R}) \approx \frac{i}{2}e^{-ik_0\tilde{R}} \approx \frac{i}{2} \exp[k_0 a] \exp[-ik_0 z] \exp \left[ -\frac{ik_0 r^2}{2(z+ia)} \right] \left( 1 + \frac{ik_0 r^4}{8(z+ia)^3} \right), \quad (5.24)$$

$$\cos(k_0\tilde{R}) \approx \frac{1}{2}e^{-ik_0\tilde{R}} \approx \frac{i}{2} \exp[k_0 a] \exp[-ik_0 z] \exp \left[ -\frac{ik_0 r^2}{2(z+ia)} \right] \left( 1 + \frac{ik_0 r^4}{8(z+ia)^3} \right). \quad (5.25)$$

On obtient alors :

$$\tilde{E}_z \approx -2ik_0^3\Psi_0 \left[ \frac{i}{k_0^3\bar{R}^3} - \frac{1}{k_0^2\bar{R}^2} - \frac{r^2}{2} \left( \frac{3i}{k_0^3\bar{R}^5} - \frac{i}{k_0\bar{R}^3} - \frac{3}{k_0^2\bar{R}^4} \right) \right] \left( 1 + \frac{ik_0r^4}{8(z+ia)^3} \right) \exp \left[ -ik_0z - \frac{ik_0r^2}{2(z+ia)} \right]. \quad (5.26)$$

En utilisant l'approximation (5.19) et les coordonnées sans dimension (5.13), on trouve ensuite :

$$\begin{aligned} \tilde{E}_z \approx & -2ik_0^3\Psi_0 \left\{ \frac{i}{k_0^3(z+ia)^3} \left( 1 - \frac{3r^2}{2(z+ia)^2} \right) - \frac{1}{k_0^2(z+ia)^2} \left( 1 - \frac{r^2}{(z+ia)^2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{r^2}{2} \left[ \frac{3i}{k_0^3(z+ia)^5} \left( 1 - \frac{5r^2}{2(z+ia)^2} \right) - \frac{i}{k_0(z+ia)^3} \left( 1 - \frac{3r^2}{2(z+ia)^2} \right) - \frac{3}{k_0^2(z+ia)^4} \left( 1 - \frac{2r^2}{(z+ia)^2} \right) \right] \right\} \\ & \times \left( 1 + \frac{ik_0r^4}{8(z+ia)^3} \right) \exp \left[ -ik_0z - \frac{ik_0r^2}{2(z+ia)} \right], \\ \tilde{E}_z = & -2ik_0^3\Psi_0 \left\{ \frac{i\delta^3}{(\zeta+i)^3} \left( 1 - \frac{3\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) - \frac{\delta^2}{(\zeta+i)^2} \left( 1 - \frac{2\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) \right. \\ & \left. - \rho^2 \left[ \frac{3i\delta^4}{(\zeta+i)^5} \left( 1 - \frac{5\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) - \frac{i\delta^2}{(\zeta+i)^3} \left( 1 - \frac{3\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) - \frac{3\delta^3}{(\zeta+i)^4} \left( 1 - \frac{4\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) \right] \right\} \\ & \times \left( 1 + \frac{i\delta\rho^4}{2(\zeta+i)^3} \right) \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta+i)} \right]. \quad (5.27) \end{aligned}$$

En ne conservant que les termes des deux ordres inférieurs en  $\delta$ , soit  $O(\delta^2)$  et  $O(\delta^3)$ , on obtient :

$$\tilde{E}_z = -2ik_0^3\Psi_0 \left[ \frac{i\delta^3}{(\zeta+i)^3} - \frac{\delta^2}{(\zeta+i)^2} + \frac{2\delta^3\rho^2}{(\zeta+i)^4} - \frac{i\delta^3\rho^4}{2(\zeta+i)^5} + \frac{i\delta^2\rho^2}{(\zeta+i)^3} - \frac{3i\delta^3\rho^4}{(\zeta+i)^5} - \frac{\delta^3\rho^6}{2(\zeta+i)^6} + \frac{3\delta^3\rho^2}{(\zeta+i)^4} \right] \times \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta+i)} \right]. \quad (5.28)$$

Si on combine les termes similaires, on trouve finalement :

$$\tilde{E}_z = 2ik_0^3\Psi_0 \left[ \left( \frac{1}{(\zeta+i)^2} - \frac{i\rho^2}{(\zeta+i)^3} \right) \delta^2 - \left( \frac{i}{(\zeta+i)^3} + \frac{5\rho^2}{(\zeta+i)^4} - \frac{7i\rho^4}{2(\zeta+i)^5} - \frac{\rho^6}{2(\zeta+i)^6} \right) \delta^3 \right] \times \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta+i)} \right]. \quad (5.29)$$

Encore une fois, le premier terme, d'ordre  $O(\delta^2)$ , correspond au terme paraxial, tandis que les quatre autres termes, d'ordre  $O(\delta^3)$ , constituent la première correction non paraxiale. Notons que le terme dominant du champ électrique longitudinal  $\tilde{E}_z$  est inférieur à celui du champ électrique radial  $\tilde{E}_r$ , d'un facteur  $\delta^{1/2}$ .

Puisque nous avons maintenant un développement perturbatif pour les deux composantes du champ électrique, on peut se demander si ce dernier satisfait correctement à l'équation de la divergence  $\nabla \cdot \tilde{\mathbf{E}} = 0$ . En coordonnées cylindriques sans dimension, l'équation de la divergence s'écrit :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial(\rho\tilde{E}_r)}{\partial\rho} + \sqrt{2\delta} \frac{\partial\tilde{E}_z}{\partial\zeta} = 0. \quad (5.30)$$

Lorsqu'on insère les champs (5.22) et (5.29) dans cette équation, on obtient, après un long calcul,

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial(\rho \tilde{E}_r)}{\partial \rho} + \sqrt{2\delta} \frac{\partial \tilde{E}_z}{\partial \zeta} = 0 + \mathcal{O}(\delta^{7/2}). \quad (5.31)$$

C'est le résultat auquel on pouvait s'attendre compte tenu de la précision sur le champ électrique.

### 5.8.3 Champ magnétique azimutal $\tilde{B}_\phi$

Terminons maintenant avec la composante azimutale du champ magnétique, qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \tilde{B}_\phi &= \frac{2}{c} k_0^3 \Psi_0 e^{-k_0 a} \sin \tilde{\theta} j_1(k_0 \tilde{R}) \\ &= \frac{2}{c} k_0^3 \Psi_0 e^{-k_0 a} \frac{r}{\tilde{R}} \left[ \frac{\sin(k_0 \tilde{R})}{k_0^2 \tilde{R}^2} - \frac{\cos(k_0 \tilde{R})}{k_0 \tilde{R}} \right]. \end{aligned} \quad (5.32)$$

En utilisant les approximations (5.24) et (5.25) ainsi que le développement en série de Taylor (5.19), on obtient

$$\begin{aligned} \tilde{B}_\phi &\approx \frac{k_0^3 \Psi_0 r}{c} \left[ \frac{i}{k_0^2 \tilde{R}^3} - \frac{1}{k_0 \tilde{R}^2} \right] \left( 1 + \frac{ik_0 r^4}{8(z+ia)^3} \right) \exp \left[ -ik_0 z - \frac{ik_0 r^2}{2(z+ia)} \right], \\ \tilde{B}_\phi &\approx \frac{k_0^3 \Psi_0 r}{c} \left[ \frac{i}{k_0^2 (z+ia)^3} \left( 1 - \frac{3r^2}{2(z+ia)^2} \right) - \frac{1}{k_0 (z+ia)^2} \left( 1 - \frac{r^2}{(z+ia)^2} \right) \right] \\ &\quad \times \left( 1 + \frac{ik_0 r^4}{8(z+ia)^3} \right) \exp \left[ -ik_0 z - \frac{ik_0 r^2}{2(z+ia)} \right]. \end{aligned} \quad (5.33)$$

On passe maintenant aux coordonnées sans dimension  $(\rho, \zeta)$  :

$$\begin{aligned} \tilde{B}_\phi &\approx \frac{\sqrt{2} k_0^3 \Psi_0 \rho}{c} \left[ \frac{i\delta^{5/2}}{(\zeta+i)^3} \left( 1 - \frac{3\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) - \frac{\delta^{3/2}}{(\zeta+i)^2} \left( 1 - \frac{2\delta\rho^2}{(\zeta+i)^2} \right) \right] \\ &\quad \times \left( 1 + \frac{i\delta\rho^4}{2(\zeta+i)^3} \right) \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta+i)} \right]. \end{aligned} \quad (5.34)$$

En ne conservant que les termes des deux ordres inférieurs en  $\delta$ , soit  $\mathcal{O}(\delta^{3/2})$  et  $\mathcal{O}(\delta^{5/2})$ , on obtient :

$$\tilde{B}_\phi = -\frac{\sqrt{2} k_0^3 \Psi_0}{c} \left[ \frac{\rho\delta^{3/2}}{(\zeta+i)^2} - \left( \frac{i\rho}{(\zeta+i)^3} + \frac{2\rho^3}{(\zeta+i)^4} - \frac{i\rho^5}{2(\zeta+i)^5} \right) \delta^{5/2} \right] \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta+i)} \right]. \quad (5.35)$$

Le premier terme, d'ordre  $\mathcal{O}(\delta^{3/2})$ , correspond au terme paraxial, tandis que les trois autres termes, d'ordre  $\mathcal{O}(\delta^{5/2})$ , constituent la première correction non paraxiale. On voit que chaque terme possède la même forme fonctionnelle que ceux qu'on retrouve dans l'expression du champ électrique radial (5.22). Le terme paraxial est identique dans les deux cas, tandis que deux des trois termes formant la première correction non paraxiale diffèrent par un facteur multiplicatif. C'est à cet ordre qu'apparaît l'asymétrie entre les composantes transverses du champ électromagnétique.

Notons que puisque  $\tilde{B}_\phi$  est indépendant de l'angle  $\phi$ , le champ magnétique satisfait trivialement à l'équation de la divergence  $\nabla \cdot \tilde{\mathbf{B}} = 0$ .



### 5.8.4 Connexion avec les travaux de Salamin

Dans un article paru en 2006 dans la revue *New Journal of Physics* [137], Salamin obtient un développement perturbatif pour le champ électromagnétique d'un faisceau  $\text{TM}_{01}$ . Il est pertinent de comparer ses résultats à ceux que nous avons obtenu dans ce complément.

La procédure suivie par Salamin diffère complètement de celle que nous avons suivie dans cet ouvrage. En effet, au lieu de partir de la solution exacte (qui n'est pas connue dans son cas), son développement perturbatif est bâti itérativement à partir de la solution paraxiale en suivant la méthode dite de Lax [88]. Bien que sa notation soit légèrement différente (par exemple, son développement perturbatif est effectué à l'aide du paramètre  $\epsilon = w_0/z_R$ ), il est assez simple de convertir ses résultats dans notre notation. On obtient alors les composantes de champ suivantes :

$$\tilde{E}_r = -\sqrt{2} k_0^3 \Psi_0 \left[ \frac{\rho \delta^{3/2}}{(\zeta + i)^2} - \left( \frac{i\rho}{(\zeta + i)^3} + \frac{2\rho^3}{(\zeta + i)^4} - \frac{i\rho^5}{2(\zeta + i)^5} \right) \delta^{5/2} \right] \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta + i)} \right], \quad (5.36)$$

$$\begin{aligned} \tilde{E}_z = 2ik_0^3 \Psi_0 & \left[ \left( \frac{1}{(\zeta + i)^2} - \frac{i\rho^2}{(\zeta + i)^3} \right) \delta^2 + \left( \frac{i}{(\zeta + i)^3} - \frac{\rho^2}{(\zeta + i)^4} + \frac{5i\rho^4}{2(\zeta + i)^5} + \frac{\rho^6}{2(\zeta + i)^6} \right) \delta^3 \right] \\ & \times \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta + i)} \right], \end{aligned} \quad (5.37)$$

$$\tilde{B}_\phi = -\frac{\sqrt{2} k_0^3 \Psi_0}{c} \left[ \frac{\rho \delta^{3/2}}{(\zeta + i)^2} + \left( \frac{i\rho}{(\zeta + i)^3} - \frac{\rho^3}{(\zeta + i)^4} + \frac{i\rho^5}{2(\zeta + i)^5} \right) \delta^{5/2} \right] \exp \left[ -i\zeta/\delta - \frac{i\rho^2}{(\zeta + i)} \right]. \quad (5.38)$$

Comme on peut voir, ces expressions ne sont pas parfaitement identiques à celles obtenues précédemment dans ce complément à partir de la solution exacte du faisceau  $\text{TM}_{01}$ . On voit toutefois que le terme paraxial est identique pour chaque composante. Également, tous les termes constituant la première correction non paraxiale de chaque composante possèdent la même forme fonctionnelle et ne diffèrent des nôtres, lorsque c'est le cas, que par une constante multiplicative réelle.

La raison pour laquelle les termes de la première correction paraxiale tels que calculés par Salamin sont différents de ceux calculés ici peut être attribuée à la méthode menant au développement perturbatif. Tel qu'expliqué récemment par Martens *et al.* [109], la réalisation d'un développement perturbatif via la méthode de Lax fait naturellement apparaître une série de constantes d'intégration. Notre solution et celle de Salamin diffèrent ainsi simplement dans le choix de la valeur de ces constantes [109]. Notons que dans le contexte de la méthode de Lax, il est possible de fixer les constantes d'intégration telles que le développement perturbatif obtenu corresponde à celui que nous avons obtenu à partir de la méthode des sources/puits ponctuels complexes [109].

## 5.9 Complément II : Remarques supplémentaires sur l'approximation paraxiale

Dans l'article présenté dans ce chapitre, nous avons vu que l'approximation paraxiale échoue à modéliser correctement la dynamique hors axe des électrons lorsqu'ils subissent une accélération sous-cycle

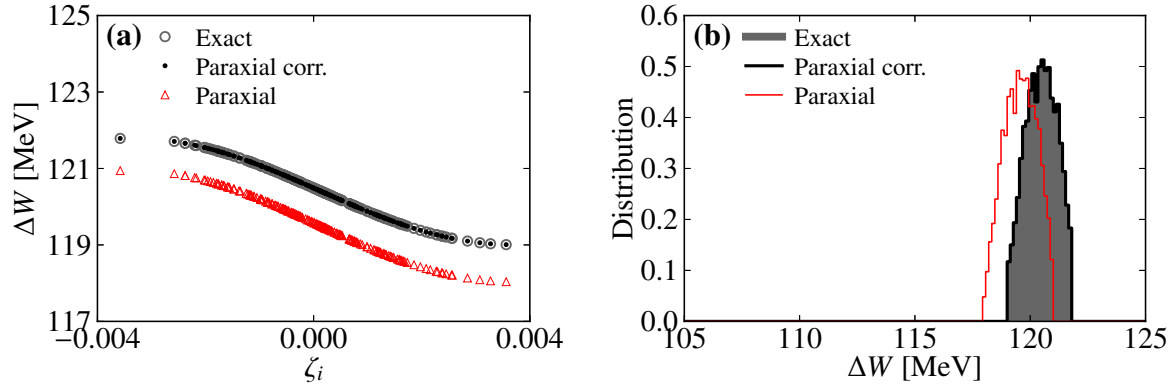


Figure 5.4 – Accélération d’un nuage linéaire d’électrons confinés à l’axe optique. Encore une fois, la simulation est réalisée trois fois, soit (i) avec le champ exact, (ii) avec le champ paraxial et (iii) avec le champ paraxial corrigé jusqu’à l’ordre  $O(\delta^3)$ . (a) Gain en énergie en fonction de la position initiale de l’électron. (b) Distribution du gain en énergie. Les résultats sont obtenus 15 ps après le passage de l’impulsion à  $z = 0$ . Seulement  $N = 200$  électrons sont illustrés en (a), tandis que  $N = 5000$  électrons ont été utilisés pour obtenir la distribution en (b). Les paramètres laser sont identiques à ceux utilisés à la figure 5.2.

dans une impulsion  $TM_{01}$ . Toutefois, il existe certains cas particuliers pour lesquels l’approximation paraxiale arrive à capturer correctement la dynamique d’accélération.

### 5.9.1 L’approximation paraxiale sur l’axe optique

Sur l’axe optique, le champ électrique radial ainsi que le champ magnétique azimutal sont tous les deux identiquement nuls. Puisque son point faible réside principalement dans la modélisation des forces transversales qui agissent sur l’électron, l’approximation paraxiale devrait arriver à bien modéliser la trajectoire des électrons qui sont confinés à l’axe optique.

Afin de s’en assurer explicitement, nous avons simulé l’accélération d’un nuage linéaire d’électrons confinés à l’axe optique. La position initiale de chaque électron sur l’axe est tirée aléatoirement d’une distribution gaussienne centrée à l’origine dont la déviation standard est  $\sigma_z = \lambda_0/10$ . Autrement, tous les paramètres sont identiques à ceux utilisés pour produire la figure 5.2. Quelques propriétés du nuage obtenu sont illustrées à la figure 5.4. Un écart d’un peu moins de 1% est observé au niveau du gain en énergie de chaque électron. Ces résultats confirment qu’il est justifié de travailler sous l’approximation paraxiale en régime de faible focalisation lorsqu’on s’intéresse au cas unidimensionnel de l’électron sur l’axe optique. On voit néanmoins que l’ajout de la première correction non paraxiale permet d’aller chercher un niveau de précision supplémentaire.

### 5.9.2 L’approximation paraxiale en régime non relativiste

Il existe un second cas particulier pour lequel l’approximation paraxiale se révèle justifiée. Il s’agit de l’accélération en régime non relativiste.

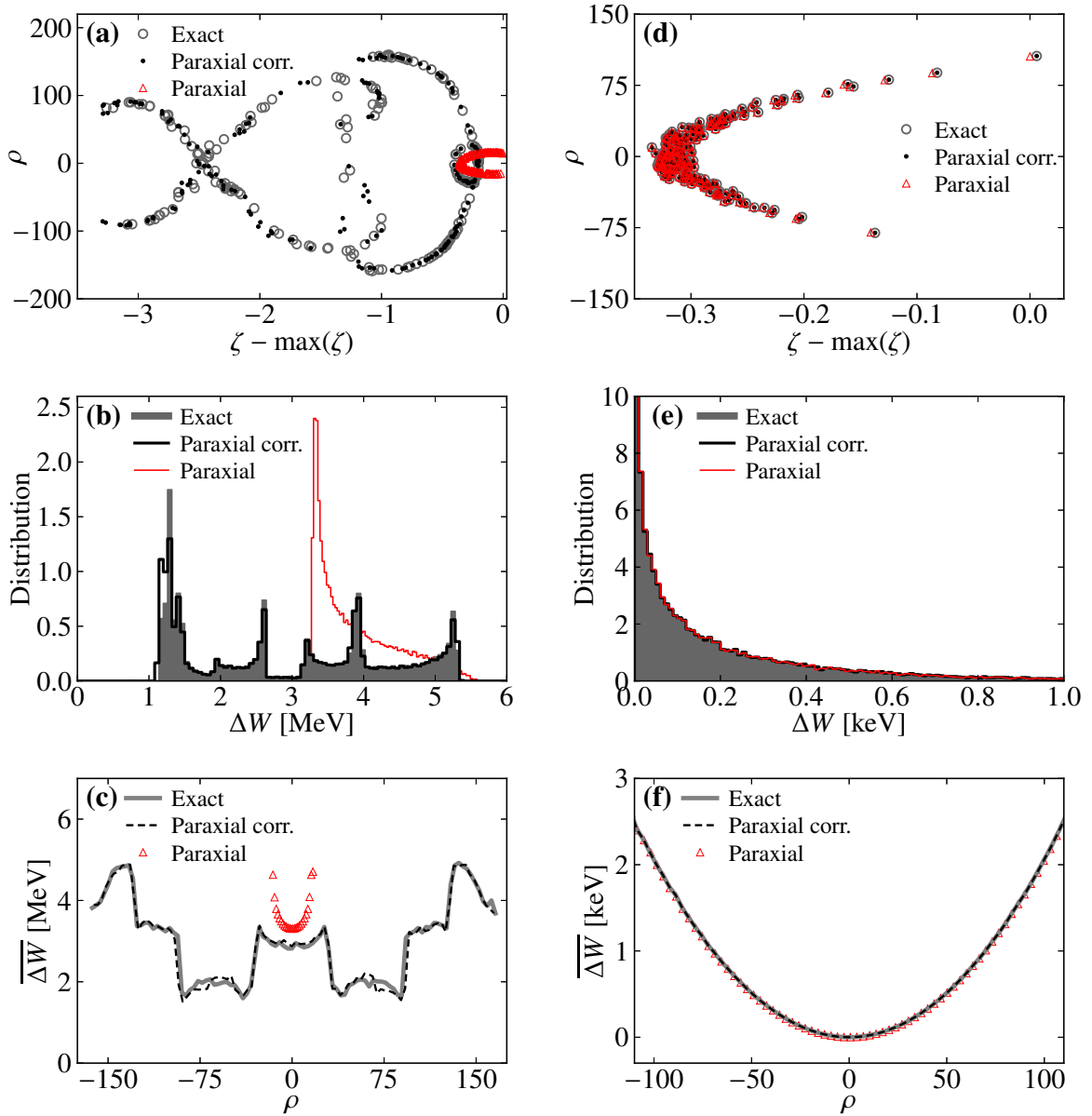


Figure 5.5 – Reprise du scénario présenté à la figure 5.2 à de plus faibles puissances laser : (a)–(c)  $P = 10^{14}$  W et (d)–(f)  $P = 10^{13}$  W. À l’exception de la puissance, tous les autres paramètres sont identiques ; il en va de même pour la signification de chaque sous-figure. À  $P = 10^{14}$  W, la dynamique est encore relativiste et par conséquent l’approximation paraxiale n’arrive pas à modéliser correctement l’accélération. Par contre, à  $P = 10^{13}$  W, la dynamique n’est pas relativiste ; l’approximation paraxiale reproduit correctement la trajectoire des électrons.

Selon l'hypothèse présentée dans ce chapitre, l'approximation paraxiale pose problème lorsque la force exercée par le champ électrique radial est parfaitement compensée par celle exercée par le champ magnétique azimutal. Cela ne peut se produire que lorsque l'électron atteint une vitesse très proche de la vitesse de la lumière, étant donné que  $\tilde{E}_r^{(0)} = c\tilde{B}_\phi^{(0)}$ . En régime non relativiste, l'électron n'atteint jamais une vitesse longitudinale considérable, et par conséquent  $\tilde{E}_r^{(0)} \gg v_z\tilde{B}_\phi^{(0)}$ . En d'autres mots, la dynamique transversale est dominée par le champ électrique radial. Dans cette situation, l'approximation paraxiale devrait ainsi arriver à modéliser correctement la trajectoire des électrons.

Pour le cas étudié dans l'article inséré dans ce chapitre, soit  $k_0a = 500$ , la puissance seuil vaut environ  $P_{\text{seuil}} \approx 6.8 \times 10^{13}$  W. Par conséquent, pour des valeurs de puissance situées sous cet ordre de grandeur, l'approximation paraxiale devrait être valide. À la figure 5.5, nous avons reproduit l'étude de cas présenté à la figure 5.2, mais pour des puissances laser plus faibles, soit  $P = 10^{14}$  W ( $P > P_{\text{seuil}}$ ) et  $P = 10^{13}$  W ( $P < P_{\text{seuil}}$ ). À  $P = 10^{14}$  W, on voit que même si les électrons atteignent une énergie au final beaucoup plus modeste que ceux de la figure 5.2, l'approximation paraxiale échoue complètement à capturer la dynamique d'accélération. Toutefois, pour  $P = 10^{13}$  W, qui correspond au régime non relativiste, on observe qu'elle donne des prédictions tout à fait similaires à celles offertes par la solution exacte. Notons par ailleurs que dans la simulation à  $P = 10^{14}$  W, la différence entre les résultats paraxiaux et exacts pour  $\rho \approx 0$  n'implique pas que l'approximation paraxiale n'arrive pas à capturer la dynamique sur l'axe optique [voir figure 5.5(c)]. Il s'agit plutôt d'une conséquence du fait que dans la simulation avec les champs exacts, certains électrons dont la position initiale est initialement en dehors de la région centrale du nuage reviennent vers l'axe optique, ce qui influence le moyennage effectué pour produire la figure 5.5(c).

En somme, on voit que l'utilisation de l'approximation paraxiale pour modéliser l'interaction d'un électron avec une impulsion  $\text{TM}_{01}$  est également justifiée à des puissances laser non relativistes. Cela renforce l'hypothèse que le problème de l'approximation paraxiale n'est au niveau de l'imprécision qu'elle entraîne dans le calcul de chaque composante du champ, mais bien au niveau de la symétrie artificielle qu'elle introduit entre les composantes  $E_r$  et  $B_\phi$ .

### 5.9.3 À quelle valeur de $k_0a$ l'approximation paraxiale devient-elle valide ?

Étant donné que l'amplitude de la première correction non paraxiale diminue lorsque  $k_0a$  augmente, on peut légitimement se demander s'il existe une valeur de  $k_0a$  à partir de laquelle l'approximation paraxiale devient valide.

Afin d'offrir une réponse simple à cette question, considérons un cas encore plus extrême que celui présenté précédemment, soit  $k_0a = 10^4$ . Ceci correspond à un faisceau dont la taille est de  $w_0 \approx 22.5\lambda_0$ . Notons que dans des conditions de focalisation aussi faible, la puissance seuil requise pour atteindre le régime relativiste est énorme, soit  $P_{\text{seuil}} \approx 2.7 \times 10^{16}$  W, une valeur très loin de la portée de la technologie laser actuelle. À l'exception de la puissance laser, qui est maintenant fixée à  $P = 5 \times 10^{16}$  W afin d'être en régime relativiste, tous les autres paramètres de la simulation sont les mêmes que

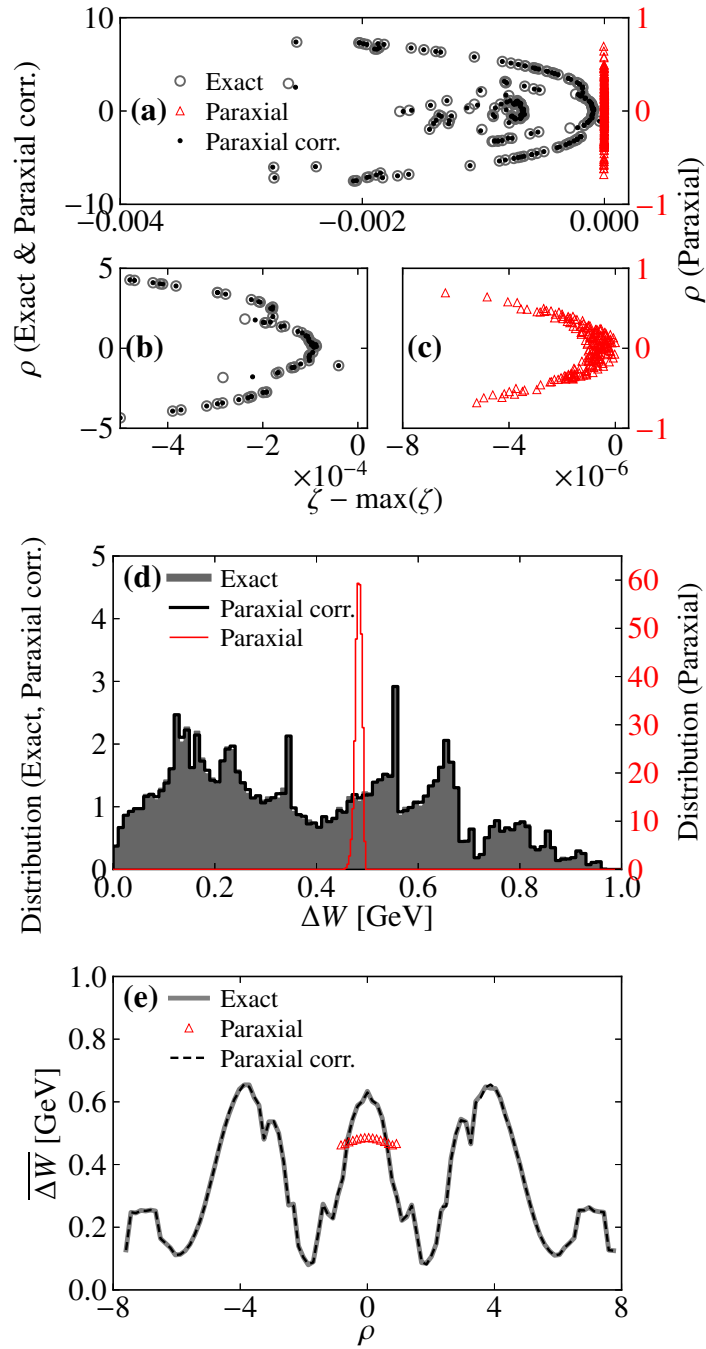


Figure 5.6 – Reprise du scénario présenté à la figure 5.2 à  $k_0 a = 10^4$ . La puissance laser a été fixée à  $P = 5 \times 10^{16}$  W afin d’être au-delà du seuil du régime relativiste. Les autres paramètres de la simulation sont identiques à ceux utilisés à la figure 5.2 ; il en va de même pour la signification de chaque sous-figure. Même à une très grande valeur de  $k_0 a$ , on voit que l’approximation paraxiale échoue à bien décrire la dynamique.

ceux utilisés à la figure 5.2. Mentionnons au passage que l'étalement transversal du nuage d'électrons, qui est de l'ordre de  $\sigma_r = \lambda_0/10$ , est significativement inférieur à la taille  $w_0$  du faisceau ; en d'autres mots, les électrons sont concentrés dans la région où les champs  $E_r$  et  $B_\phi$  sont relativement très faibles. On pourrait donc penser que dans ces conditions, l'approximation paraxiale pourrait parvenir à faire des prédictions acceptables. Or, comme le montrent les résultats présentés à la figure 5.6, il n'en est rien. Des différences très importantes demeurent observables entre les résultats obtenus avec la solution exacte et ceux produits par la solution paraxiale.

En conclusion, même à d'énormes valeurs de  $k_0a$ , l'approximation paraxiale échoue à capturer correctement la dynamique d'accélération en régime ultra-relativiste. Il serait bien sûr possible d'étendre cette analyse à des valeurs de  $k_0a$  encore plus grandes. Toutefois, ces faisceaux de très faible focalisation ont très peu d'intérêt pratique en ce qui concerne l'accélération d'électrons par champ longitudinal – on rappelle que la puissance seuil augmente comme  $(k_0a)^2$ . Par conséquent, pour les cas d'intérêt pratique, la leçon à retenir est qu'il est toujours avisé de travailler avec une solution aussi précise que possible.

## 5.10 Complément III : L'approximation de l'enveloppe lente

Dans l'article inséré dans ce chapitre, l'analyse du champ électromagnétique a été entièrement effectuée sous l'approximation de l'enveloppe lente. En d'autres mots, pour les champs paraxiaux comme pour les champs exacts, un faisceau pulsé a été modélisé en multipliant la solution (exacte ou paraxiale) pour la composante de fréquence  $\omega_0$  à l'équation de Helmholtz par une enveloppe temporelle de forme sécante hyperbolique. Le choix de travailler sous l'approximation de l'enveloppe lente a été fait afin de simplifier significativement les développements mathématiques présentés dans l'article et ainsi d'isoler les conséquences de l'approximation paraxiale. En effet, l'analyse perturbative du champ dans la limite  $k_0a \gg 1$  est beaucoup plus complexe avec une impulsion exacte, pour laquelle il y a existence d'un couplage spatiotemporel.

Dans ce dernier complément, nous présentons quelques résultats qui montrent que l'approximation de l'enveloppe lente a certes un certain effet sur la dynamique d'accélération, mais que l'erreur engendrée est beaucoup moins importante que dans le cas de l'approximation paraxiale.

Afin d'isoler l'effet de l'approximation de l'enveloppe lente, nous avons effectué quelques simulations pour lesquelles les résultats obtenus avec (i) l'impulsion  $TM_{01}$  exacte avec spectre de Poisson [équations (2.72)–(2.74)] ont été comparés avec (ii) ceux obtenus avec la solution exacte à l'équation de Helmholtz pour le faisceau  $TM_{01}$  [équations (5.1)–(5.3)] multipliée par une enveloppe temporelle gaussienne [équation (2.52)]. La forme gaussienne a été choisie étant donné que le spectre de Poisson tend vers un spectre gaussien dans la limite  $s \gg 1$ . Le paramètre de durée de l'impulsion gaussienne a été fixé à  $T = 7.5$  fs, tandis que le paramètre  $s = 155$  a été utilisé dans la solution exacte (rappelons que  $T \approx \sqrt{2s}/\omega_0$  dans la limite  $s \gg 1$ ). Autrement, tous les autres paramètres (phase  $\phi_0$ , paramètres  $k_0a$  et conditions initiales) sont identiques au cas considéré à la figure 5.2. Les résultats sont illustrés

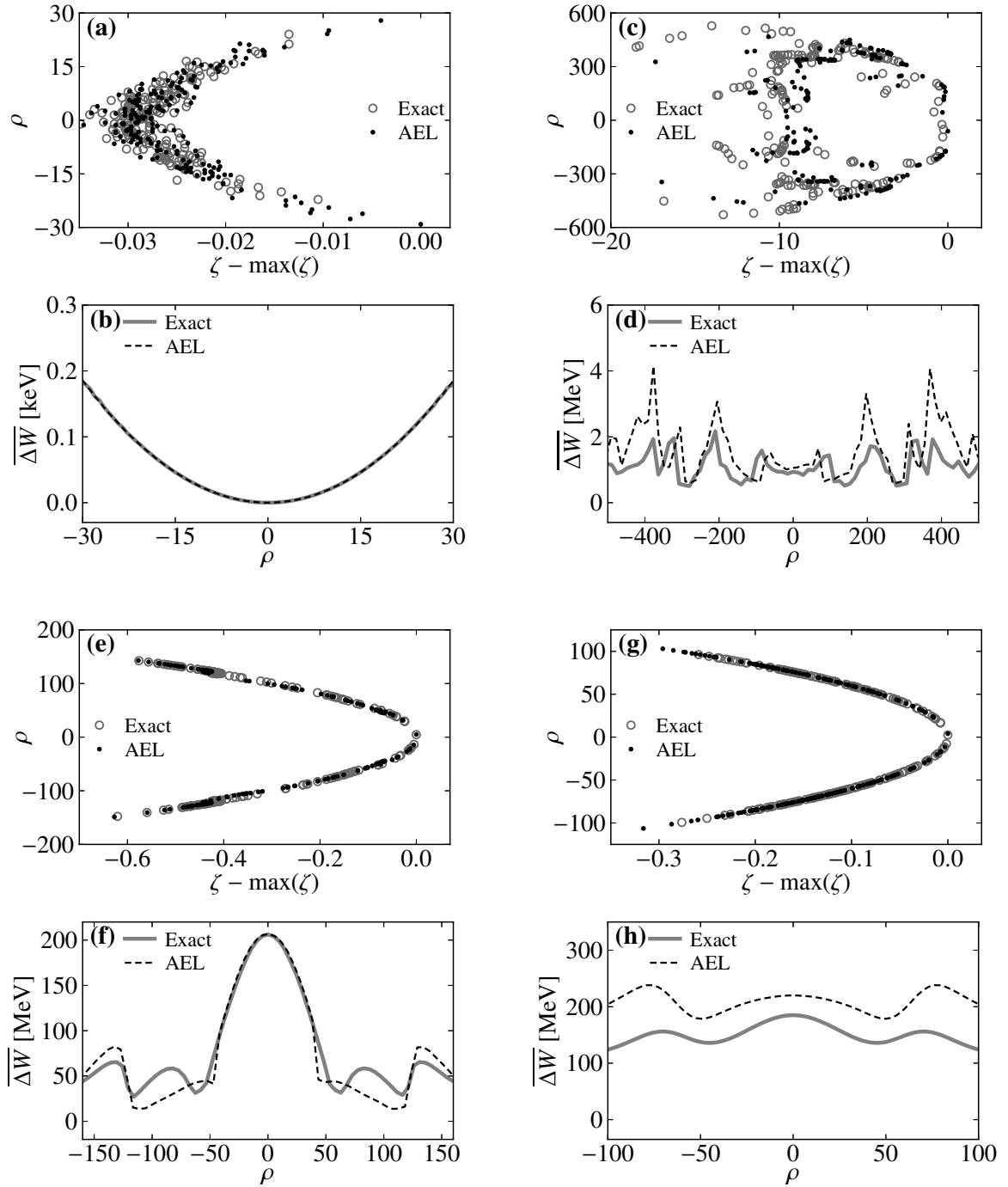


Figure 5.7 – Analyse de l’effet de l’approximation de l’enveloppe lente sur l’accélération d’un nuage d’électrons par une impulsion  $TM_{01}$ . La simulation est réalisée à deux reprises, soit (i) avec l’impulsion  $TM_{01}$  exacte [équations (2.72)–(2.74)] et (ii) avec le faisceau  $TM_{01}$  monochromatique [équations (5.1)–(5.3)] multiplié par une enveloppe temporelle gaussienne (AEL : approximation de l’enveloppe lente). Le paramètre de durée de l’impulsion gaussienne est fixé à  $T = 7.5$  fs ( $s = 155$ ). La puissance laser vaut (a)–(b)  $P = 10^{13}$  W, (c)–(d)  $P = 10^{14}$  W, (e)–(f)  $P = 10^{15}$  W et (g)–(h)  $P = 10^{16}$  W. Les autres paramètres de la simulation sont identiques à ceux utilisés à la figure 5.2 ; il en va de même pour la signification des sous-figures.

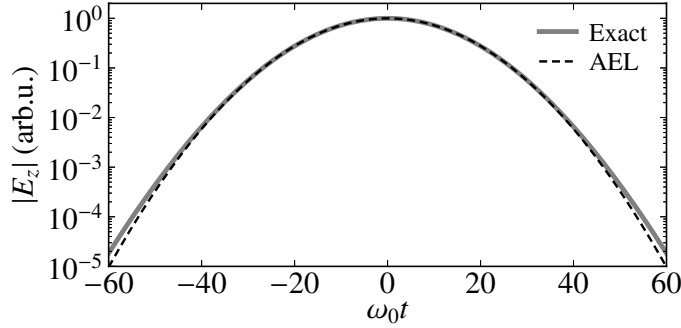


Figure 5.8 – Comparaison entre l’amplitude du champ électrique longitudinal issu de l’impulsion  $TM_{01}$  exacte avec spectre de Poisson et celui issu de l’approximation de l’enveloppe lente avec enveloppe gaussienne. L’amplitude du champ diminue plus rapidement lorsqu’on s’éloigne du centre de l’impulsion dans le cas de l’impulsion gaussienne. Les paramètres utilisés sont  $T = 7.5$  fs ( $s = 155$ ) et  $k_0 a = 500$ .

à la figure 5.7 pour quatre valeurs différentes de la puissance laser.

En régime non relativiste [figure 5.7(a)–(b)], la formulation du champ faisant intervenir l’approximation de l’enveloppe lente arrive à reproduire avec une très bonne précision les résultats de la simulation réalisée avec l’impulsion exacte. Comme c’était le cas avec l’approximation paraxiale à basse puissance, ceci est dû au fait que l’électron glisse à travers l’impulsion laser au complet. Comme il n’acquiert jamais une vitesse importante, une petite différence au niveau de la valeur du champ électromagnétique n’a pas une grande influence sur l’aspect global de sa trajectoire.

Des différences commencent à apparaître lorsqu’on entre en régime relativiste et ultra-relativiste [figures 5.7(c)–(h)]. Bien que les résultats obtenus avec l’approximation de l’enveloppe lente ne reproduisent pas parfaitement ceux obtenus avec le champ exact, on voit que les propriétés générales des impulsions d’électrons obtenues (configuration spatiale et profil énergétique) demeurent similaires, ce qui n’était pas le cas sous l’approximation paraxiale. Les différences obtenues peuvent être attribuées au fait qu’à haute puissance, l’électron peut subir une accélération importante dans un demi-cycle situé loin du centre de l’impulsion, où le champ issu de l’approximation de l’enveloppe lente ne reproduit pas parfaitement bien le champ exact (voir figure 5.8). La légère différence au niveau de l’amplitude du champ longitudinal est alors susceptible de causer une erreur appréciable sur la trajectoire globale de l’électron.

Afin d’illustrer ce dernier argument, considérons un électron initialement au repos à l’origine dans le cas ultra-relativiste où  $P = 10^{16}$  W, cas qui a précédemment été illustré aux figures 5.7(g)–(h). Un exemple de trajectoire calculée avec l’impulsion exacte et avec l’approximation de l’enveloppe lente est illustré à la figure 5.9. À la figure 5.9(a), on voit que l’électron accéléré par le champ sous l’approximation de l’enveloppe lente atteint une énergie finale plus importante. Afin de comprendre pourquoi, il est utile de regarder les premiers cycles d’accélération et de décélération. Comme le montrent les figures 5.9(c)–(d), l’électron atteint, sous l’approximation de l’enveloppe lente, des éner-



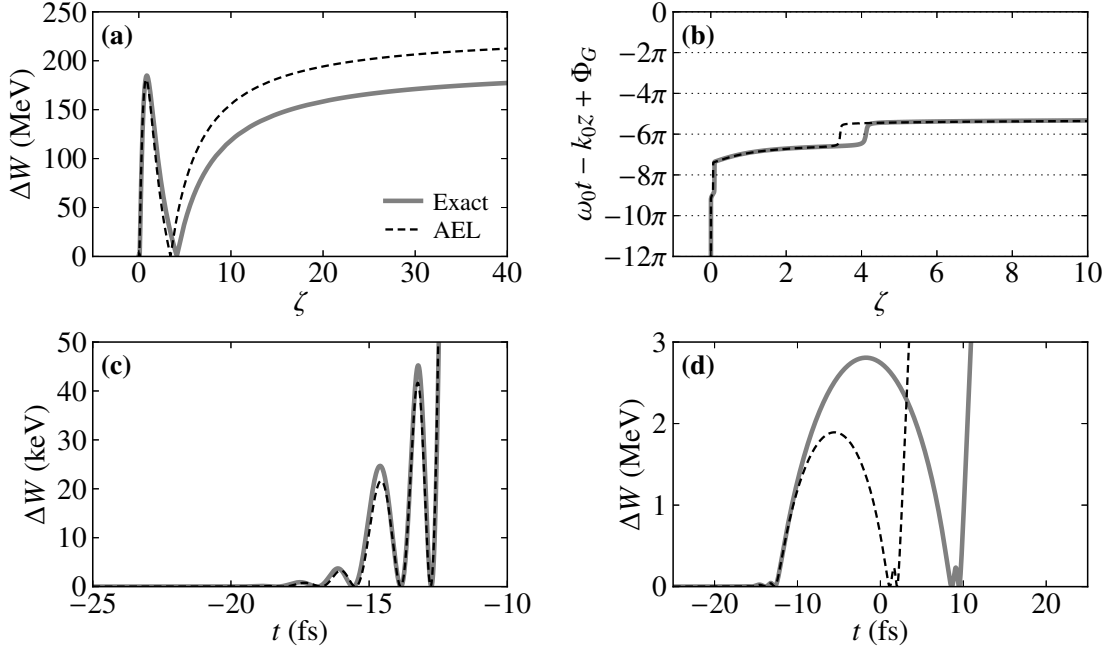


Figure 5.9 – Trajectoire d’un électron initialement au repos à l’origine pour le cas à  $P = 10^{16}$  W considéré à la figure 5.7. La simulation est réalisée à deux reprises, soit (i) avec l’impulsion  $TM_{01}$  exacte [équations (2.72)–(2.74)] et (ii) avec le faisceau  $TM_{01}$  monochromatique [équations (5.1)–(5.3)] multiplié par une enveloppe temporelle gaussienne (AEL : approximation de l’enveloppe lente). (a) Énergie de l’électron en fonction de sa position sur l’axe optique lors de sa trajectoire. (b) Phase du champ laser,  $\omega_0 t - k_0 z - 2 \arctan(z/a)$ , en fonction de la position de l’électron. On voit que dans le cas de l’approximation de l’enveloppe lente, l’électron entre dans son demi-cycle d’accélération final plus près du foyer. (c)–(d) Agrandissement des premiers cycles d’oscillation de l’électron.

gies plus faibles lors ses premières oscillations dans le champ longitudinal. Ceci est dû au fait que loin du centre de l’impulsion, l’amplitude du champ est plus faible lorsqu’on travaille avec une enveloppe gaussienne qu’avec l’impulsion issue du spectre de Poisson (voir figure 5.8). Puisque l’électron est moins énergétique, il faut par conséquent une moins grande distance pour le décélérer dans le cycle qui précède son demi-cycle d’accélération final. Il peut ainsi entrer dans ce dernier cycle d’accélération plus près du foyer, bénéficiant ainsi de la poussée ultime du champ électrique longitudinal sur une plus grande distance.

En conclusion, on voit que l’approximation de l’enveloppe lente a un effet moins dramatique que l’approximation paraxiale en ce qui concerne l’accélération d’électrons par impulsions  $TM_{01}$ . Cela appuie son utilisation dans le cadre de l’article présenté dans ce chapitre. Néanmoins, nous avons vu que les différences qu’elle engendre peuvent devenir dans certains cas appréciables, particulièrement dans des conditions ultra-relativistes. Afin d’avoir des résultats les plus rigoureux possible, il demeure donc conseillé d’utiliser une solution exacte aux équations de Maxwell.



## Chapitre 6

# Génération d'impulsions d'électrons ultrabrèves, partie I : preuve de concept

Article original :

**Femtosecond 240-keV electron pulses from direct laser acceleration in a low-density gas**

Vincent Marceau<sup>1</sup>, Charles Varin<sup>2</sup>, Thomas Brabec<sup>2</sup> et Michel Piché<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centre d'Optique, Photonique et Laser, Université Laval, Québec, Québec, Canada.

<sup>2</sup>Center for Research in Photonics, University of Ottawa, Ottawa, Ontario, Canada.

Référence : Physical Review Letters 111, 224801 (2013).

© 2013 The American Physical Society (§6.2–§6.7)

## 6.1 Avant-propos

De manière similaire aux photons, les électrons peuvent être utilisés pour sonder la matière. Combinant une longueur d'onde de de Broglie très courte (de l'ordre de  $\lambda_{dB} \approx 4$  pm à  $W = 100$  keV) et une section efficace d'interaction élevée (de l'ordre de  $10^5 - 10^6$  fois plus grande que celle des rayons x), ils s'avèrent particulièrement utiles dans les expériences d'imagerie atomique et moléculaire. La *diffraction électronique ultrarapide*<sup>1</sup> est une technique qui consiste à envoyer des impulsions brèves d'électrons dont l'énergie est de l'ordre de 50 à 300 keV sur un échantillon afin d'obtenir de l'information sur sa structure via une figure de diffraction. Dans ces expériences, la durée de l'impulsion d'électrons joue le rôle de temps d'exposition ; plus les impulsions sont brèves, plus la résolution temporelle est élevée.

Au chapitre précédent, nous avons entrevu le potentiel des impulsions  $TM_{01}$  pour la production d'impulsions d'électrons ultrabrèves (par exemple, la forme du paquet d'électrons obtenu à la figure 5.2 témoigne d'une forte compression longitudinale). L'utilisation d'impulsions  $TM_{01}$  à cette fin particulière a déjà été étudiée dans quelques publications [75, 178]. Dans ces dernières, on démontre la génération d'impulsions attosecondes d'électrons à partir de cibles de taille nanométrique illuminées par une impulsion  $TM_{01}$  dont la puissance est de l'ordre de 100 TW ou plus. L'énergie des électrons, allant de quelques dizaines de MeV à quelques GeV, est toutefois beaucoup trop élevée pour envisager une application à la diffraction électronique ultrarapide.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la possibilité de générer des impulsions d'électrons ultrabrèves à des énergies de l'ordre de la centaine de keV avec des impulsions  $TM_{01}$  ultrabrèves et fortement focalisées. Ayant comme motivation principale une application potentielle à la diffraction électronique, un souci particulier est apporté dans le choix des paramètres physiques du système, qui se veulent réalistes dans le contexte technologique actuel.

En lien étroit avec les simulations de type particule test, nous présentons pour la première fois dans ce chapitre des simulations de type particle-in-cell (PIC). Tandis que l'utilisation de charges tests nous permet d'en apprendre plus sur le fonctionnement du mécanisme d'accélération, les simulations PIC permettent de vérifier l'impact des effets d'ionisation et de charge d'espace sur la génération des impulsions d'électrons. Cette démarche a pour effet d'amener nos résultats à un niveau supérieur de réalisme.

Ce chapitre est constitué de deux parties. La première partie (sections §6.2 à §6.7) correspond à un article qui a été publié dans la revue *Physical Review Letters* en novembre 2013 [106]. Elle est par conséquent rédigée en anglais, à l'exception d'une version française du résumé. Les sections §6.8 et §6.9 offrent ensuite quelques précisions sur différents aspects abordés dans l'article.

---

1. Une introduction à la diffraction électronique ultrarapide est présentée à la section §6.9 de ce chapitre.

## 6.2 Résumé

Nous proposons un schéma d'accélération laser permettant de produire des impulsions femtosecondes d'électrons avec une énergie de l'ordre de quelques centaines de keV. Notre méthode est basée sur l'utilisation d'impulsions laser ultrabrèves et fortement focalisées de polarisation radiale. Sous l'influence du champ électrique longitudinal, les électrons situés dans le volume focal sont accélérés dans la direction de propagation de l'impulsion laser. Grâce à des simulations tridimensionnelles de type particule test et *particle-in-cell*, nous démontrons qu'il est possible de produire des impulsions d'électrons bien collimées avec un étalement en énergie de 5% et une durée temporelle de l'ordre de la femtoseconde. Ces résultats ouvrent une avenue intéressante vers l'amélioration de la résolution temporelle dans les expériences de diffraction électronique ultrarapide.

## 6.3 Abstract

We propose a simple laser-driven electron acceleration scheme based on tightly focused radially polarized laser pulses for the production of femtosecond electron bunches with energies in the few-hundreds-of-keV range. In this method, the electrons are accelerated forward in the focal volume by the longitudinal electric field component of the laser pulse. Three-dimensional test-particle and *particle-in-cell* simulations reveal the feasibility of generating well-collimated electron bunches with an energy spread of 5% and a temporal duration of the order of 1 fs. These results offer a route towards unprecedented time resolution in ultrafast electron diffraction experiments.

## 6.4 Introduction

The development of high-power laser facilities all around the world has paved the way to the design of a new generation of laser-based electron accelerators. Recent experimental successes have shown that electrons may be accelerated to hundreds-of-MeV energies from high-intensity laser-plasma interactions [12, 11, 184]. Laser-driven electron accelerators are thus expected to offer a robust, compact, and low-cost alternative to conventional radio-frequency (rf) accelerators [100].

While most studies have been concerned with the laser acceleration of electron bunches to energies ranging from several MeV to the GeV level [43], comparatively little work has been done at lower energies (e.g., [27, 68, 126, 168, 170]).

In fact, due to their large scattering cross section in comparison to x-rays, subrelativistic electrons find important applications in atomic and molecular imaging experiments [145]. In the last few years, electrons at subrelativistic energies have been successfully used in time-resolved ultrafast electron diffraction (UED) experiments to study dynamical processes on the subpicosecond time scale [55, 64, 144]. In the latter experiments, the electrons are generated from the illumination of a photocathode by a femtosecond laser pulse and are subsequently accelerated in a static electric field. Using this method, electron bunches with a duration between 200 and 350 fs and energy in the 50–100 keV range can

be produced [145]. In addition, using state-of-the-art rf cavities to invert the linear velocity chirp, the electron bunches can be compressed down to about 70 fs at the sample [173], while the timing jitter between the laser and the rf electronics can be reduced to 30 fs with the time stamping method [54]. Bunches of shorter durations ( $\sim 10$  fs) have been predicted by replacing the static accelerator with a rf gun that accelerates the electrons at energies of a few MeV [63]. However, due to the reduced scattering cross section of relativistic electrons and other practical considerations, the 100–300 keV energy window is generally preferred for UED [172].

Recently, laser-driven electron acceleration has been proposed as an alternative to static accelerator technology for UED experiments [69, 167, 168]. In principle, laser acceleration has several advantages [69]: (i) the short wavelength of the accelerating field may lead to electron bunches with duration of the order of 10 fs or less; (ii) there is an intrinsic synchronization between the electron probe and the laser pump; (iii) using a gas medium, the electron source is self-regenerating and can thus be used for experiments at high repetition rates. In [167], 350-keV electron bunches were produced from a high-intensity laser-solid interaction and compressed down to 500 fs, while in [69], 100-keV bunches with a duration possibly under 100 fs, although not measured, were generated with a laser-wakefield accelerator. Subfemtosecond electron pulses are predicted in plasmas with ramp-up density profiles, but at relativistic energies [90].

In this Letter, we propose a simple direct acceleration scheme based on the use of tightly focused radially polarized laser pulses for the generation of electron bunches with unprecedentedly short duration in an energy range appropriate for UED applications. This method takes advantage of the strong longitudinal electric field at the beam center to accelerate the electrons from the focal region along the optical axis [175]. We demonstrate the feasibility of generating 240-keV, one-femtosecond electron pulses when the laser pulse is tightly focused in a low-density gas. The acceleration mechanism is first analyzed using a three-dimensional test-particle approach. We then investigate the limits of validity of these results using three-dimensional particle-in-cell (3DPIC) simulations with full ionization dynamics. We finally discuss how the proposed acceleration scheme could find applications in time-resolved UED experiments.

## 6.5 Numerical model

Ultrashort and tightly focused laser pulses must be modeled as exact solutions to Maxwell's equations. We consider the lowest-order radially polarized laser field, namely a  $\text{TM}_{01}$  pulse, for which an exact closed-form solution is known [7, 103]. In vacuum, the nonzero field components of a  $\text{TM}_{01}$  pulse traveling in the forward  $z$  direction with its beam waist plane located at  $z = 0$  are given, in cylindrical coordinates  $(r, \theta, z)$ , by the following expressions:

$$E_r(\mathbf{r}, t) = \text{Re} \left\{ \frac{3\Psi_0 \sin \tilde{\theta} \cos \tilde{\theta}}{\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(0)}}{\tilde{R}^2} + \frac{G_+^{(1)}}{c\tilde{R}} + \frac{G_-^{(2)}}{3c^2} \right) \right\}, \quad (6.1)$$

$$E_z(\mathbf{r}, t) = \text{Re} \left\{ \frac{\Psi_0}{\tilde{R}} \left[ \frac{(3 \cos^2 \tilde{\theta} - 1)}{\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(0)}}{\tilde{R}} + \frac{G_+^{(1)}}{c} \right) - \frac{\sin^2 \tilde{\theta}}{c^2} G_-^{(2)} \right] \right\}, \quad (6.2)$$

$$B_\phi(\mathbf{r}, t) = \text{Re} \left\{ \frac{\Psi_0 \sin \tilde{\theta}}{c \tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(1)}}{c \tilde{R}} + \frac{G_+^{(2)}}{c^2} \right) \right\}, \quad (6.3)$$

where  $\text{Re}\{\dots\}$  denotes the real part,  $\Psi_0$  is a constant amplitude,  $c$  is the speed of light in vacuum,  $\tilde{R} = [r^2 + (z + ja)^2]^{1/2}$ ,  $\cos \tilde{\theta} = (z + ja)/\tilde{R}$ , and  $G_\pm^{(n)} = \partial_t^n [f(\tilde{t}_-) \pm f(\tilde{t}_+)]$  with  $\tilde{t}_\pm = t \pm \tilde{R}/c + ja/c$ . The confocal parameter  $a$  can be used to characterize the degree of paraxiality of the beam since it is related to the Rayleigh range  $z_R$  at wavelength  $\lambda_0$  by  $k_0 z_R = \sqrt{1 + (k_0 a)^2} - 1$  [134]. The function  $f(t)$  is the inverse Fourier transform of the frequency spectrum of the pulse, which we assume to be Poisson-like [31]:

$$F(\omega) = 2\pi e^{-j\phi_0} \left( \frac{s}{\omega_0} \right)^{s+1} \frac{\omega^s e^{-s\omega/\omega_0}}{\Gamma(s+1)} H(\omega), \quad (6.4)$$

where  $s$  is a positive parameter related to the pulse duration,  $\phi_0$  is the constant pulse phase,  $\omega_0 = ck_0$  is the frequency of maximum amplitude,  $\Gamma(x)$  is the gamma function, and  $H(x)$  is the Heaviside step function. The fields given by Eqs. (6.1)–(6.3) may be produced by focusing a collimated radially polarized input beam with a parabolic mirror of large aperture [9].

Conceptually, our accelerator design simply consists of an ultrashort  $\text{TM}_{01}$  pulse that is strongly focused in a low-density gas target of uniform density  $n_0$ . This configuration is very similar to the experimental setup recently used by Payeur *et al.* [126]. To simulate the laser-driven electron acceleration, we perform three-dimensional simulations using the Epoch PIC code [26] (see Complement I in Sec. §6.8 for additional details about the numerical simulations). The fields given in Eqs. (6.1)–(6.3) are implemented in the code using the scattered-field formulation [160].

We consider a  $\text{TM}_{01}$  pulse characterized by  $k_0 a = 20$  and  $s = 70$  with an average power of  $P = 300$  GW and a dominant wavelength of  $\lambda_0 = 800$  nm. This gives a pulse with a full width at half maximum (FWHM) duration of 8.3 fs. The center of the pulse is set to reach the beam waist plane at  $t_0 = 80$  fs. The spatiotemporal properties of the pulse in vacuum at the beam waist are illustrated in Fig. 6.1. The chosen laser parameters correspond to a regime accessible by current millijoule lasers that can operate at kHz repetition rate with carrier-envelope phase stabilization [33, 110].

In analogy to the standard normalized vector potential parameter  $a_0 = e|E|/m_e c \omega_0$  [65], it is useful to introduce a normalized longitudinal field parameter  $a_z = e|E_z|_{\text{peak}}/m_e c \omega_0$  [175]. At  $a_z \gtrsim 1$ , the motion of a free electron in the longitudinal electric field becomes relativistic. Consequently, *subcycle acceleration*, i.e., the process in which the electron is accelerated by staying in phase with the laser field over a certain distance, starts to take place [179]. On the one hand, subcycle acceleration induces a strong longitudinal compression over a cloud of electrons, which promotes the formation of ultrashort electron bunches [75, 178]. On the other hand, if the value of  $a_z$  is too high, the electrons will acquire an energy that will be too great for any use in electron diffraction experiments. For the chosen laser

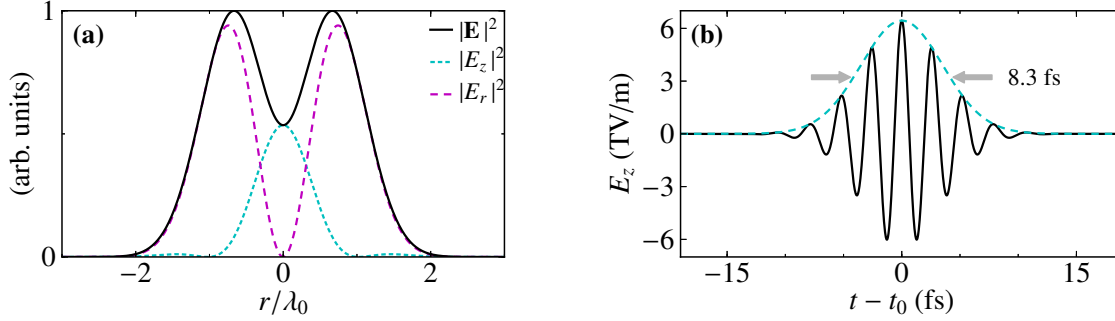


Figure 6.1 – Electric field of a  $TM_{01}$  pulse with  $k_0a = 20$ ,  $s = 70$ ,  $P = 300$  GW, and  $\lambda_0 = 800$  nm. (a) Electric energy density at the beam waist. (b) Temporal variation of  $E_z$  at the origin.

pulse parameters, we have  $a_z \approx 1.6$ , a good tradeoff between the longitudinal compression induced by subcycle acceleration and the final kinetic energy of the electrons.

## 6.6 Generation of ultrashort electron pulses

### 6.6.1 Test-particle simulations

To investigate the acceleration dynamics, we adopt in the first place a three-dimensional test-particle approach in which all electrons are initially assumed to be free and space-charge effects are neglected. The electrons are initially distributed randomly in space according to a uniform distribution. As the laser pulse approaches the focal region, two main electron jets are formed: an annular electron jet is accelerated away from the optical axis under the influence of the radial electric field component, and a well-collimated electron bunch is accelerated in the forward  $z$  direction by the longitudinal electric field component. Figure 6.2 illustrates the main properties of this on-axis electron bunch. At the instant the snapshots shown in Fig. 6.2 are taken, the interaction of the electron bunch with the laser pulse is already terminated. The divergence of the bunch is estimated to be 6 mrad, while its duration, given by the longitudinal extent of the bunch divided by the average velocity of the electrons, is of the order of 730 as. The energy distribution of the electron bunch, shown in Fig. 6.2(d), displays a well-defined maximum at  $\Delta W = 237$  keV with a small absolute energy spread of  $\text{fwhm}(\Delta W) = 6$  keV. Accelerating subfemtosecond electron pulses with radially polarized laser pulses using an infinite target is noteworthy, as previous techniques had to rely on nanometric targets and ultrarelativistic laser intensities ( $a_z^2 \gg 1$ ) [75, 178].

To get a better understanding of the formation of the ultrashort electron pulse reported in Fig. 6.2, it is instructive to identify the origin of the electrons of which it is made. Figure 6.3(a) maps the initial coordinates of a free electron in the  $(x, z)$  plane to its final transverse coordinate. The most remarkable feature is the presence of a thin vertical band at  $z_0 \approx 2.15\lambda_0$  extending from  $x_0 = 0$  to  $x_0 \approx 0.5\lambda_0$  that corresponds to electrons that remain within a distance of  $\lambda_0/2$  from the optical axis. Moreover, as shown in Fig. 6.3(b), this set of initial conditions is correlated with a region where the



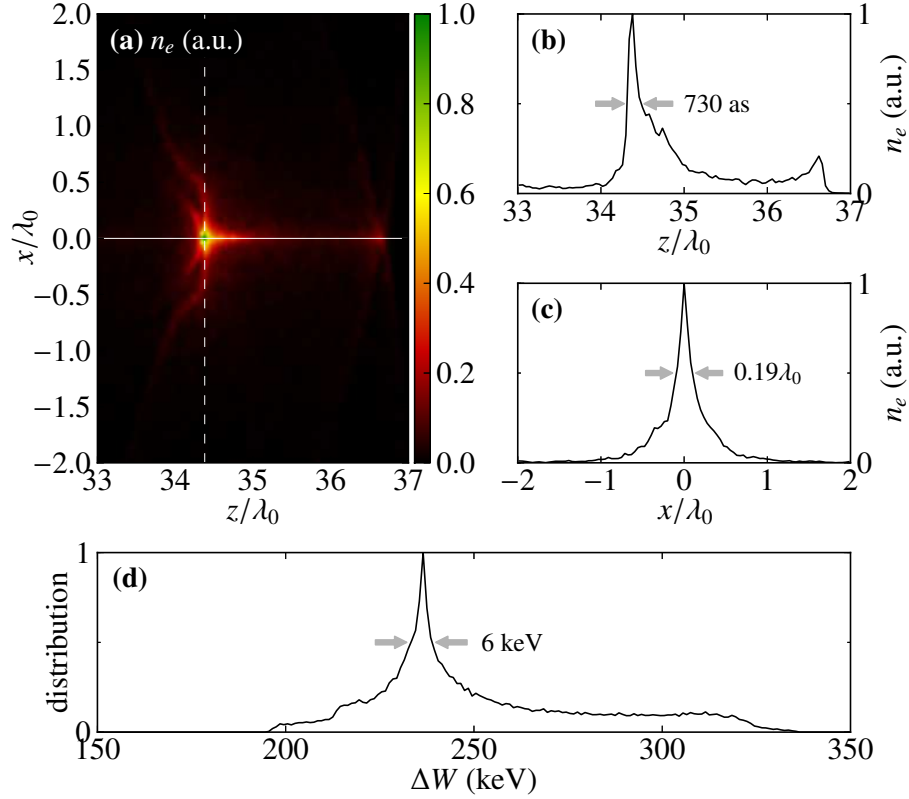


Figure 6.2 – Characterization of an ultrashort electron bunch produced after the interaction of a  $k_0 a = 20$ ,  $s = 70$ ,  $P = 300$  GW,  $\phi_0 = \pi$  laser pulse with a target of free and noninteracting electrons. (a) Electron number density  $n_e$  in the  $(x, z)$  plane. The solid and dashed white lines indicate the locations of the  $z$  and  $x$  cuts shown in (b) and (c), respectively. The arrows in (b) and (c) indicate the full width at half maximum duration and width. (d) Kinetic energy distribution. The snapshot is taken at  $t - t_0 = 120$  fs. Only the electrons with  $\Delta W > 50$  keV located in the  $(x, z)$  region shown in (a) and within a slice of thickness  $\lambda_0$  centered at  $y = 0$  are considered to obtain the distribution functions. The simulation is performed using  $10^9$  markers randomly distributed in the region  $x, y \in [-5\lambda_0, 5\lambda_0]$ ,  $z \in [-14\lambda_0, 50\lambda_0]$ .

final kinetic energy of the electrons is extremely similar. Therefore, the formation of an ultrashort electron pulse originates from the acceleration of a thin disk of electrons located in a very restricted region of the infinite gas target. Electrons outside this thin disk region are either deflected away from the optical axis [see Fig. 6.3(c)] or gain little energy from the laser field. We emphasize that the acceleration process is sensitive to the carrier-envelope phase, a clear signature of direct acceleration that distinguishes our scheme from ponderomotive acceleration, which is a process independent of the laser pulse phase [159]. Here, substantial energy gains are possible because an asymmetry between consecutive positive and negative half field cycles is introduced by nonlinear relativistic effects, the ultrashort (few-cycle) pulse duration, and the strong field divergence ( $z_R \sim 3\lambda_0$ ).

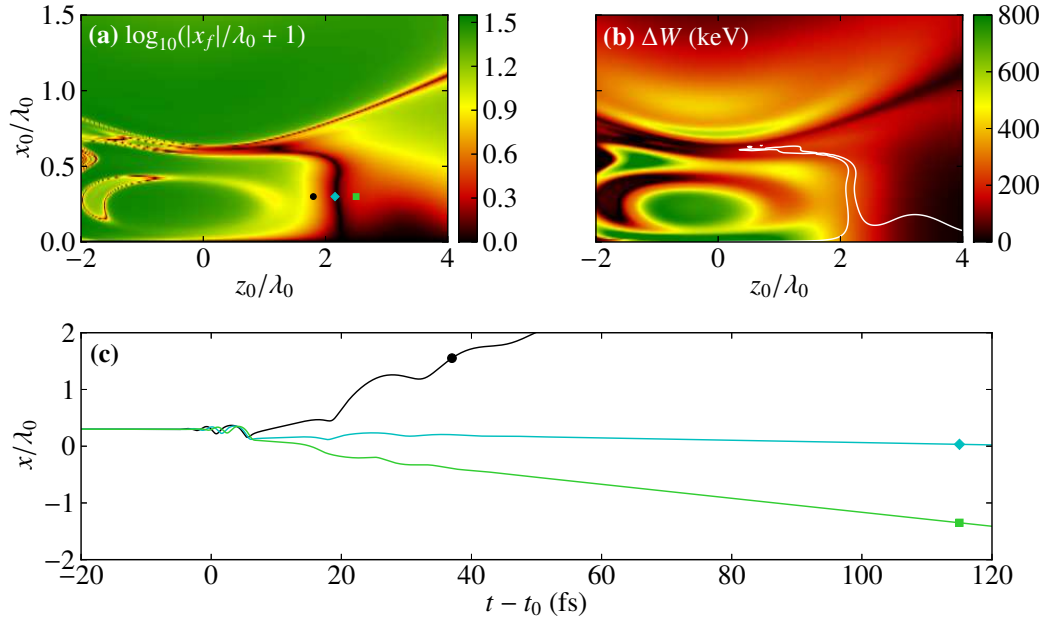


Figure 6.3 – (a) Final  $x$  coordinate [ $\log_{10}(|x_f|/\lambda_0 + 1)$ ] and (b) final kinetic energy at time  $t - t_0 = 120$  fs for a free electron initially at rest at the position  $(x_0, z_0)$  in the  $(x, z)$  plane. The three markers in (a) correspond to three initial conditions for which the trajectory is illustrated in (c). The white curve in (b) corresponds to the  $|x_f| = 0.5\lambda_0$  contour. All laser parameters are identical to those used in Fig. 6.2.

### 6.6.2 Three-dimensional particle-in-cell simulations

Having studied the acceleration mechanism in the single particle limit, we now proceed with a much more realistic 3DPIC approach. We assume that the initial target consists of a neutral hydrogen gas of uniform atomic density  $n_0$  at room temperature. Multiphoton, tunnel, and barrier-suppression ionization are taken into account [87]. Figure 6.4(a)–(d) show the results of a simulation performed at an initial density of  $n_0 = 3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$  with the same laser parameters as in Fig. 6.2. The electron pulse produced from the hydrogen target possesses features very similar to those reported in Fig. 6.2. Its duration is slightly above one femtosecond, with a peak areal density and a total charge of  $2 \times 10^{-3} \text{ C}\cdot\text{m}^{-2}$  and 1.1 fC, respectively. The charge was obtained by counting up the electrons located within a cylinder of radius  $\lambda_0$  extending from  $z = 33\lambda_0$  to  $z = 37\lambda_0$  [see Fig. 6.4(a)]. We calculate the fraction of the electrons within the FWHM of the longitudinal and radial density distribution to be 2.4%. We emphasize that due to the ionization dynamics, other elements than hydrogen might not be used to generate monoenergetic electron pulses. In fact, we have observed that 3DPIC simulations with helium yield an energy distribution with two distinct peaks (see chapter 7).

In Fig. 6.4(e), we illustrate the variation of the main features of the electron pulse as a function of the initial density  $n_0$ . Well-collimated, monoenergetic one-femtosecond pulses are observed up to densities of about  $n_0 = 3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . Up to this density, the bunch charge increases linearly. As  $n_0$  is raised above  $3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ , the electron pulse duration and its energy spread increase under the

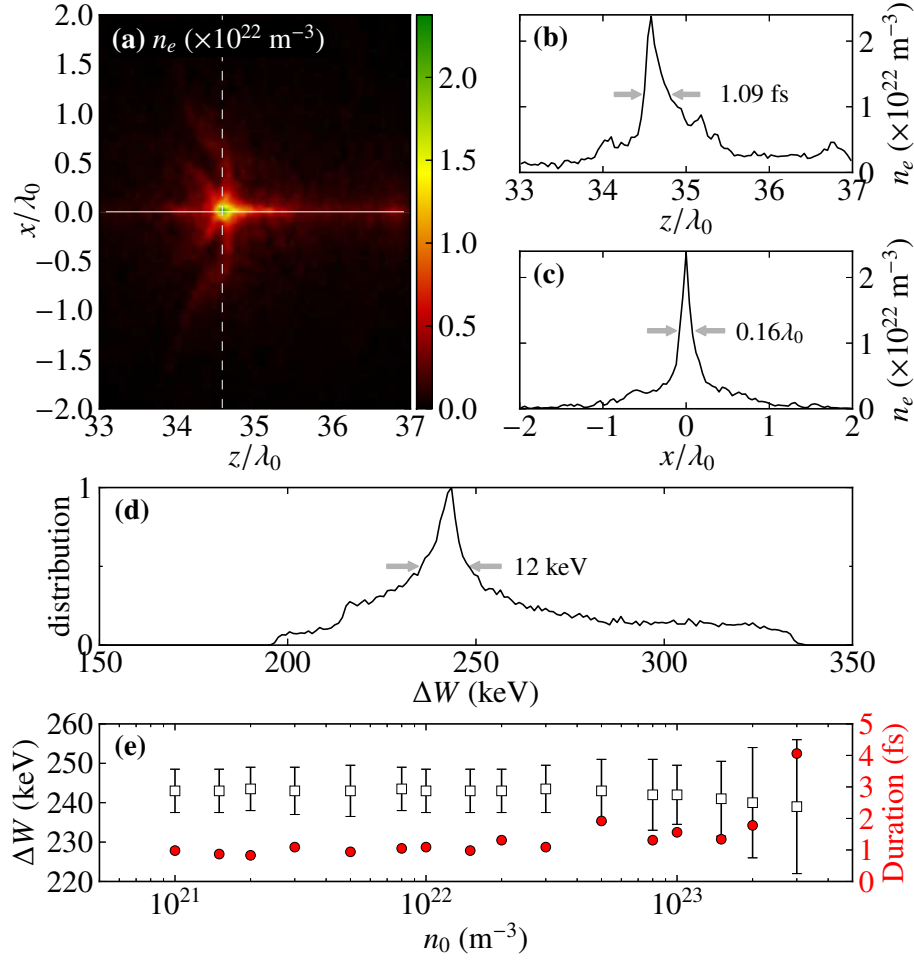


Figure 6.4 – (a)–(d) Three-dimensional particle-in-cell simulation corresponding to the case shown in Fig. 6.2. The target consists of neutral hydrogen with a uniform density of  $n_0 = 3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . (e) Variation of the peak energy and energy spread (square markers with error bars, left scale), and duration (circle markers, right scale) of the electron pulse as a function of the initial atomic density  $n_0$ . In each case, the simulation is performed using  $5 \times 10^8$  hydrogen markers randomly distributed on a  $200 \times 200 \times 1000$  grid with  $N_\lambda = 20$  points per wavelength resolution, corresponding to the region  $x, y \in [-5\lambda_0, 5\lambda_0]$ ,  $z \in [-10\lambda_0, 40\lambda_0]$ . The statistics are obtained at  $t - t_0 = 120 \text{ fs}$ . Increasing the grid resolution to  $N_\lambda = 30$  does not significantly alter the results.

influence of electrostatic repulsion. At initial atomic densities of  $n_0 = 3 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$  and above, the electron pulse is rapidly broadened by space-charge forces.

## 6.7 Discussion

The possibility of generating femtosecond monoenergetic electron bunches suggests that the proposed acceleration scheme could offer an interesting avenue towards unprecedented time resolution in UED experiments (see Complement II in Sec. §6.9 for an introductory discussion about UED). In this

perspective, the *transverse normalized emittance* and the *transverse coherence length* are important parameters. The normalized emittance, which estimates the volume occupied by the electron beam in phase space, is given, in the  $x$  direction, by  $\epsilon_{n,x} = (1/m_e c) \sqrt{\langle x^2 \rangle \langle p_x^2 \rangle - \langle x p_x \rangle^2}$ , where  $\langle \dots \rangle$  denotes an average over the electrons in the bunch [172]. With the electrons from the same region that was used to calculate the bunch charge in Fig. 5(a) we get  $\epsilon_{n,x} = \epsilon_{n,y} = 3.6 \times 10^{-3}$  mm·mrad, which compares favorably to state-of-the-art UED setups ( $\epsilon_{n,x} \approx 2 \times 10^{-2}$  mm·mrad [69, 172]). The transverse coherence length is calculated with  $L_T \approx \lambda/2\pi\sigma_\theta$ , where  $\lambda$  is the de Broglie wavelength and  $\sigma_\theta$  is the root-mean-square angular spread [172]. Here we obtain  $L_T = 0.03$  nm, which is too small for UED. Nevertheless, we estimate that filtering the electron pulses with a pinhole would remove the most divergent electrons and increase the transverse coherence length beyond 1 nm. With the remaining electrons per pulse ( $10^2$ – $10^3$ ), an electron flux sufficient for time-resolved crystallography experiments would be possible at a kHz repetition rate (see, e.g., [15]). Finally, we recall that for the proposed scheme—which is a subcycle laser process—the energy spread is intrinsically low (about 5%). Energy filtering as done in [167] might be beneficial, but is probably not necessary.

Still in connection with UED, we stress that free-space propagation is needed for the electron pulse to reach the sample, which causes spatiotemporal broadening. Nevertheless, the use of a strongly focused, rapidly diverging, laser pulse ( $z_R \sim 3\lambda_0$ ) could allow having the sample very close to the focus. With the available computational resources, we were able to simulate the propagation of the electron pulse for 1.1 ps. Whereas the radius of the electron pulse did not change significantly, the pulse duration, after an initial transient behavior, increased linearly at the rate of 0.027 fs/ $\mu$ m. This asymptotic linear behavior is in agreement with existing theoretical models [151]. It thus appears that pulse compression will be needed to keep the duration at the sample below 30 fs for a focus-sample distance larger than 1 mm. For state-of-the-art compression techniques see [167, 173].

Finally, we emphasize that besides UED, the proposed acceleration scheme might also be of interest for electron injection into x-ray free electron lasers and staged (channel-guided) laser wakefield accelerators, as well as for the development of tabletop radiation sources. For those applications, relativistic energies are needed. Preliminary results for the actual acceleration scheme show that it would be possible to double the electron energy only by tuning the laser power, while preserving a good beam quality [fwhm( $\Delta W$ )/ $\Delta W \sim 10\%$  or less]. The laser pulse parameters were not submitted to an intensive optimization process. Reaching the few-MeV range is the object of ongoing research.

## 6.8 Complément I : Remarques supplémentaires sur les simulations numériques

Les simulations PIC réalisées pour l'article présenté dans les sections précédentes ont été effectuées avec  $N = 5 \times 10^8$  marqueurs sur une grille numérique de taille  $200 \times 200 \times 1000$  correspondant à la région  $x, y \in [-5\lambda_0, 5\lambda_0]$  et  $z \in [-10\lambda_0, 40\lambda_0]$ . Ceci correspond à un maillage de taille  $\Delta x, \Delta y, \Delta z = \lambda_0/20$ , ou, en d'autres mots, à une résolution de  $N_\lambda = 20$  mailles par longueur d'onde. L'impact

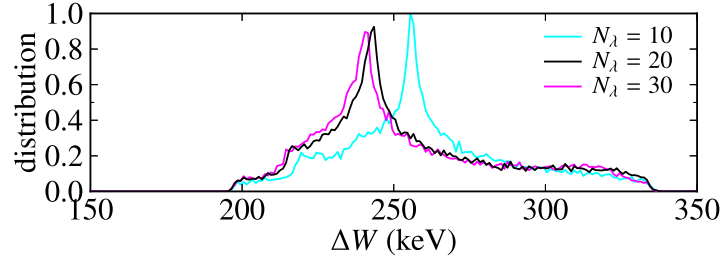


Figure 6.5 – Impact de la résolution de la grille numérique sur les résultats de la simulation PIC présentée à la figure 6.4(a)–(d). La figure illustre la distribution en énergie, précédemment illustrée à la figure 6.4(d), telle qu’obtenue lorsque  $N_\lambda = 10, 20$  et  $30$ . Dans tous les cas, la simulation a été réalisée en utilisant le domaine physique  $x, y \in [-5\lambda_0, 5\lambda_0]$  et  $z \in [-10\lambda_0, 40\lambda_0]$  avec  $N = 5 \times 10^8$  marqueurs ; la taille de la grille numérique est déterminée par la valeur de  $N_\lambda$ . Les ressources numériques requises pour simuler l’intervalle de temps  $t \in [0, 200 \text{ fs}]$  sont approximativement (i) 8h de calcul sur 128 coeurs pour  $N_\lambda = 10$ , (ii) 18h de calcul sur 128 coeurs pour  $N_\lambda = 20$  et (iii) 18h de calcul sur 512 coeurs pour  $N_\lambda = 30$ .

de la résolution de la grille sur les résultats est illustré sur la figure 6.5 ; les ressources numériques nécessaires à chaque cas étudié sont indiquées dans la légende. La valeur  $N_\lambda = 20$  a été choisie comme étant le meilleur compromis entre la qualité des résultats et les ressources numériques nécessaires.

Les simulations PIC réalisées dans ce chapitre et dans le reste de cette thèse négligent les effets collisionnels. Quelques calculs simples peuvent nous permettre de vérifier que cette approche est justifiée. Le type de plasma qui nous intéresse possède<sup>2</sup> une densité de l’ordre de  $n_e \sim 10^{23} \text{ m}^{-3}$  et une température qui est au minimum de l’ordre de  $T_e \sim 1 \text{ keV}$ . D’après la figure 3.1, ces paramètres correspondent à un plasma très faiblement couplé. Effectuons néanmoins quelques estimations numériques.

Tout d’abord, le paramètre de dégénérescence, donné à l’équation (3.1), vaut ici

$$\Theta = \frac{2m_e k_B T_e}{\hbar^2 (3\pi^2 n_e)^{2/3}} \approx 1.27 \times 10^6. \quad (6.5)$$

Nous sommes donc en régime classique, caractérisé par  $\Theta \gg 1$ . La longueur d’onde de Debye du plasma et le nombre de Debye lui étant associé valent, selon l’équation (3.2) :

$$\lambda_D = \left( \frac{\epsilon_0 k_B T_e}{e^2 n_e} \right)^{1/2} \approx 7.43 \times 10^{-7} \text{ m} \quad (6.6)$$

$$N_D = \frac{4\pi}{3} n_e \lambda_D^3 \approx 1.72 \times 10^5. \quad (6.7)$$

Le plasma, caractérisé par  $N_D \gg 1$ , est donc faiblement couplé. Par ailleurs, on voit que le maillage de la grille utilisé dans les simulations PIC, soit  $\lambda_0/20$ , est suffisamment petit pour résoudre la longueur d’onde de Debye, une condition nécessaire pour bien modéliser les phénomènes collectifs qui se produisent dans le plasma. Notons également qu’à  $\lambda_0 = 800 \text{ nm}$ , les plasmas considérés ont une

2. Il s’agit ici d’ordres de grandeur approximatifs. Le lecteur pourra toutefois facilement se convaincre que les résultats de cette analyse demeurent valides pour les ordres de grandeur adjacents aux valeurs choisies.

densité beaucoup plus faible que la densité critique  $n_c$ , densité à partir de laquelle le plasma écran le champ électromagnétique de l'impulsion laser [57] :

$$n_c = \frac{4\pi^2 c^2 \epsilon_0 m_e}{e^2 \lambda_0^2} \approx 1.74 \times 10^{27} \text{ m}^{-3} \gg n_e . \quad (6.8)$$

Finalement, le temps caractéristique associé aux collisions électrons-électrons dans le plasma peut être estimé par [18] :

$$\tau_{ee} = \left[ \frac{n_e}{2\pi} \left( \frac{e^2}{3\epsilon_0 k_B T_e} \right)^2 \left( \frac{3k_B T_e}{m_e} \right)^{1/2} \ln \Lambda \right]^{-1} \approx 5.54 \times 10^{-9} \text{ s} , \quad (6.9)$$

où  $\ln \Lambda = \ln(6\pi n_e \lambda_D^3)$  est le logarithme de Coulomb. Le temps caractéristique  $\tau_{ei}$  associé aux collisions électrons-ions est du même ordre de grandeur que  $\tau_{ee}$  [18]. On peut donc affirmer que dans nos simulations, qui se déroulent sur une échelle temporelle inférieure à la picoseconde, il est raisonnable de négliger les effets collisionnels, dont le rôle devient important sur l'échelle de la nanoseconde.

## 6.9 Complément II : Diffraction électronique ultrarapide

Au cours des dernières décennies, le développement de techniques expérimentales pompe-sonde résolues dans le temps a permis d'approfondir notre connaissance des processus fondamentaux en physique, en chimie et en biologie. Très utiles à beaucoup d'égards, les techniques spectroscopiques standards en optique ne peuvent toutefois pas fournir une description purement *atomique* des phénomènes physiques et chimiques ultrarapides. Bien que la résolution temporelle nécessaire soit accessible, la résolution spatiale de ces techniques est limitée par la longueur d'onde de la radiation utilisée. À titre d'exemple, la longueur d'onde nominale des systèmes laser femtosecondes commerciaux est de l'ordre du micron, tandis que les techniques de génération d'impulsions attosecondes opèrent dans ultraviolet extrême, à des longueurs d'onde de l'ordre d'une centaine de nanomètres.

Afin d'observer la matière à l'échelle de l'atome, il est nécessaire d'utiliser une sonde dont la longueur d'onde est de l'ordre de la distance interatomique, soit de l'ordre de 1 Å. Il est possible d'atteindre cette résolution spatiale en utilisant des rayons X durs avec une énergie de l'ordre de 10 keV ou bien des électrons (rappelons que  $\lambda_{dB} \approx 4 \text{ pm}$  à  $W = 100 \text{ keV}$ ). L'utilisation de ces particules, photons ou électrons, pour sonder la matière peut se faire via le phénomène de diffraction. Dans de tels cas, une figure de diffraction est obtenue dans l'espace réciproque, et est ensuite inversée pour obtenir la structure dans l'espace réel.

Ce complément se veut une brève introduction à la technique de la diffraction électronique ultrarapide. En plus de mettre nos travaux en contexte, le but de cette section est de fournir au lecteur une perspective générale sur ce domaine scientifique qui, nous croyons, se veut une application intéressante de notre schéma d'accélération laser.

### 6.9.1 Électrons et rayons X

Suite à leur découverte en 1895 par Röntgen (prix Nobel de physique, 1901), l'utilisation de la diffraction par rayons X en cristallographie remonte aux années 1912-1913 avec les travaux de von Laue (prix Nobel de physique, 1914) et de Bragg, père et fils (prix Nobel de physique, 1915). Dans les décennies suivantes, la diffraction par rayons X a permis la détermination de la structure tridimensionnelle moyennée dans le temps d'une grande diversité de matériaux, allant des sels diatomiques (NaCl) aux protéines, en passant par des composés biologiques complexes comme les virus [193]. Parmi les grands succès rendus possibles grâce à la diffraction par rayons X, mentionnons en particulier la découverte de la structure hélicoïdale de l'ADN en 1953 par Watson et Crick [185], ce qui leur a valu le prix Nobel de médecine en 1962.

L'histoire de la diffraction électronique s'écrit presque en parallèle à celle de la diffraction par rayons X au 20<sup>e</sup> siècle. Ses fondements consistent en la découverte de l'électron en 1897 par J. J. Thomson (prix Nobel de physique, 1906) et le postulat de sa nature ondulatoire en 1924 par de Broglie (prix Nobel de physique, 1929). La découverte de la diffraction des électrons par des cristaux remonte aux travaux de Davisson, Werner, G. P. Thomson et Reid en 1927 [36, 165], pour lesquels Davisson et G. P. Thomson se sont mérités conjointement le prix Nobel de physique en 1937. Trois ans plus tard, Mark et Wierl effectuent la première expérience de diffraction électronique avec un échantillon gazeux [108]. Dans les décennies suivantes, les techniques et applications de la diffraction électronique se sont grandement améliorées, culminant avec la détermination d'une grande variété de structures cristallines, biologiques, d'échantillons gazeux, etc. [58].

Dans les techniques traditionnelles de diffraction électronique ou de diffraction par rayons X, on obtient une information spatiale en trois dimensions moyennée dans le temps. La dimension temporelle est rendue inaccessible par le fait que les faisceaux d'électrons ou de rayons X interagissent avec l'échantillon sur une échelle temporelle beaucoup plus longue que celle sur laquelle les atomes et les molécules se déplacent. Afin de visualiser les structures transitoires, il est ainsi nécessaire de produire des impulsions d'électrons ou de rayons X dont la durée est de l'ordre de l'échelle de temps du phénomène à l'étude.

Dans le développement des sources visant à faire de la diffraction ultrarapide résolue dans le temps, les électrons présentent plusieurs caractéristiques uniques par rapport aux rayons X :

- *Une plus grande section efficace d'interaction.* À énergie identique, la section efficace d'interaction des électrons est de 5 à 6 ordres de grandeur supérieure à celle des rayons X [41]. À cause de leur forte interaction avec la matière, les électrons permettent entre autres l'étude de surfaces, de cristaux très minces et d'échantillons gazeux [193]. Il s'agit toutefois d'un couteau à double tranchant. La forte interaction des électrons avec la matière, qui vient du fait que ce sont des particules chargées qui interagissent via la force de Coulomb, fait également en sorte qu'il est difficile de produire des impulsions d'électrons à la fois très denses et très brèves.
- *Moins dommageables pour l'échantillon.* L'énergie déposée par collision élastique utile est



environ trois ordres de grandeur plus faible pour les électrons que pour les rayons X [151]. Par conséquent, les électrons ont tendance à causer moins de dommage à l'échantillon que les rayons X.

- *Des expériences à l'échelle du laboratoire.* Les expériences de diffraction électronique ultrarapide nécessitent l'utilisation de sources laser femtosecondes commerciales et sont ainsi réalisables à l'intérieur d'un laboratoire standard. À l'opposé, les sources de rayons X possédant l'intensité nécessaire pour être utilisées à des fins de diffraction ultrarapide sont de taille colossale, plus précisément de l'ordre de plusieurs kilomètres. À titre d'exemple, le projet *European XFEL* à Hambourg, en Allemagne, et le projet *LCLS* à Stanford, aux États-Unis, nécessitent tous les deux une infrastructure de plus de trois kilomètres de long.

Toutes ces raisons ont fait en sorte que plusieurs groupes de recherche se sont intéressés au développement de sources d'électrons ultrabrèves et à leur utilisation dans le cadre d'expériences de diffraction électronique ultrarapide. Le principe et l'appareillage typiquement utilisé dans ces expériences sont décrits dans la section qui suit.

## 6.9.2 Diffraction électronique ultrarapide : principe et instrumentation

Le principe de fonctionnement d'une expérience de diffraction électronique ultrarapide est conceptuellement assez simple. De manière semblable à la photographie, il s'agit de prendre une « photo » d'un échantillon avec un temps d'exposition suffisamment court pour capturer sa structure instantanée durant un processus où celle-ci change rapidement. Si le temps d'exposition est trop long par rapport aux changements, l'image obtenue sera floue et la photo obtenue contiendra en quelque sorte une information moyennée dans le temps.

Dans une expérience de diffraction électronique ultrarapide, la source d'électrons est synchronisée avec une source laser femtoseconde qui agit à titre de pompe et initie un processus (transition de phase, réaction chimique, etc.) dans l'échantillon. Une fois le processus initié par une impulsion laser, l'impulsion d'électrons vient sonder l'échantillon et produit une figure de diffraction. Pour résoudre temporellement la structure de l'échantillon, on répète la séquence pompe-sonde pour différentes valeurs du délai temporel entre les deux événements. On obtient alors une série de figures de diffraction qui, une fois inversées, permettent de visualiser l'évolution temporelle de la structure de l'échantillon.

L'appareillage typique utilisé dans une expérience de diffraction électronique ultrarapide est illustré à la figure 6.6. Tel que décrit dans l'introduction de l'article présenté dans ce chapitre, la quasi-totalité des montages expérimentaux sont basés sur l'utilisation d'un accélérateur dc comme source d'électrons. L'accélérateur dc consiste simplement en une photocathode et une anode entre lesquels il existe une différence de potentiel constante. Les électrons sont émis par effet photoélectrique lorsqu'une impulsion laser femtoseconde est envoyée sur la cathode, et ils sont ensuite accélérés par le champ dc jusqu'à l'anode trouée, qui joue en même temps un rôle d'iris dans le montage. À la sortie de l'accélérateur, l'impulsion d'électrons est ensuite manipulée spatialement à l'aide de lentilles magnétiques et compressée temporellement à l'aide d'une cavité rf qui compense la dispersion en vitesse.



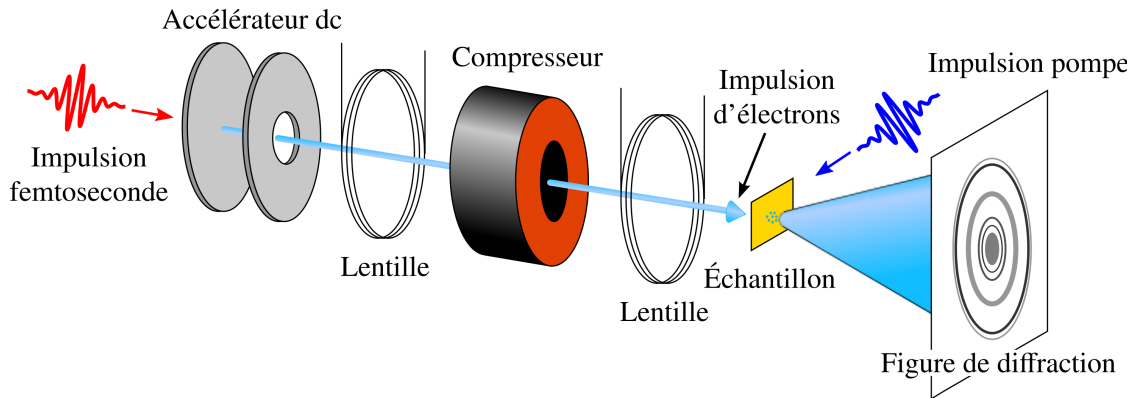


Figure 6.6 – Représentation schématique d'un montage de diffraction électronique ultrarapide avec un accélérateur dc. Une impulsion d'électrons, issue d'un processus de photoémission, est accélérée par une différence de tension constante, puis est ensuite collimée et compressée avant son arrivée à l'échantillon. Figure inspirée de [145].

Les paramètres du montage sont choisis afin que l'impulsion d'électrons atteigne l'échantillon à un délai précis après l'impulsion laser pompe.

Afin de mener avec succès une expérience de diffraction électronique ultrarapide, il est désirable que les impulsions d'électrons satisfassent certains critères. Voici les principaux :

- *La durée.* Afin d'avoir la résolution temporelle nécessaire pour monitorer l'évolution de phénomènes ultrarapides, les impulsions d'électrons doivent être aussi brèves que possible. Par exemple, pour résoudre les modes normaux de vibrations moléculaires, on parle d'une résolution de l'ordre de 10 fs. Dans les accélérateurs dc actuels, le champ électrique d'extraction est limité à environ  $10^7$  V/m, ce qui limite la durée initiale de l'impulsion d'électrons à sa sortie de l'accélérateur [145]. Produisant des champs accélérateurs beaucoup plus élevés et nécessitant ainsi une distance et un temps d'accélération beaucoup plus courts, les techniques d'accélération laser ont le potentiel d'atteindre des durées initiales beaucoup plus courtes que les accélérateurs dc conventionnels.
- *La cohérence.* Afin de générer une figure d'interférence après leur interaction avec l'échantillon, les électrons doivent posséder la cohérence spatiale nécessaire. Sur le plan conceptuel, cela représente un défi car les électrons sont des fermions et ne peuvent exister dans le même état ; en d'autres mots, contrairement aux photons, il n'est pas possible de produire un dispositif à émission stimulée (un « laser ») qui générerait un faisceau d'électrons. Les limites imposées par la cohérence spatiale deviennent un enjeu principalement dans la direction transverse, puisque pour la plupart des impulsions d'électrons, la longueur de cohérence longitudinale est beaucoup plus grande que l'épaisseur de l'échantillon. Une règle de pouce veut que la longueur de cohérence transverse soit de l'ordre de 3 fois la taille de la structure qui doit être observée [145]. Pour des mailles cristallines et des molécules simples dont la taille est de quelques Angstroms, une longueur de cohérence transverse de l'ordre du nanomètre est généralement suffisante. Plus

de détails sur le calcul de la longueur de cohérence seront donnés au chapitre suivant.

- *La monoénergéticité.* Idéalement, les électrons doivent posséder une énergie aussi similaire que possible. Ce critère est en lien avec les deux précédents. En effet, plus la distribution en énergie de l'impulsion d'électrons est étroite, moins l'impulsion va avoir tendance à s'étirer en se propageant en raison de la dispersion en vitesse. Par ailleurs, plus les électrons ont une énergie similaire, plus ceux-ci auront tendance à avoir une grande cohérence. Afin de fournir un ordre de grandeur, mentionnons que des expériences de diffraction électronique ultrarapide basées sur des schémas d'accélération laser ont déjà été réalisées avec des impulsions d'électrons dont la distribution en énergie présentait une pleine largeur à mi-hauteur (FWHM) allant de 1% [168] à 8% [69].
- *La charge.* Afin d'obtenir une figure de diffraction claire avec une seule impulsion d'électrons (régime *single-shot*), il est généralement admis que les impulsions doivent minimalement contenir  $10^5 - 10^6$  électrons (de 16 fC à 160 fC) [145, 172]. Des expériences récentes ont toutefois rapporté des figures de diffraction obtenues avec un seul tir à l'aide d'impulsions contenant  $4 \times 10^4$  électrons (6 fC) [167]. Lorsque la charge par impulsion est trop faible pour obtenir une figure de diffraction avec un ratio signal-sur-bruit suffisamment élevé, il est nécessaire d'accumuler les données sur plusieurs tirs, d'où l'intérêt des systèmes laser avec un taux de répétition élevé. Si le phénomène étudié est irréversible, cela peut impliquer de déplacer mécaniquement l'échantillon entre chaque tir.

Enfin, bien que conceptuellement assez simples, les expériences de diffraction électronique ultrarapide présentent énormément de défis expérimentaux qui ne peuvent être énumérés dans ce complément à caractère introductif. Le lecteur intéressé à obtenir plus d'informations techniques sur la diffraction électronique ultrarapide est invité à consulter, entre autres, les articles de revue [145] et [193].

### 6.9.3 Un exemple : la fusion de l'aluminium

La fusion, soit le passage de la matière de l'état solide à l'état liquide, est un phénomène que nous côtoyons sur une base quotidienne. Sa description apparaît dans tout bon livre de référence en thermodynamique. Bien qu'on pourrait croire que tout est connu depuis longtemps sur cette transition de phase, il s'avère qu'elle peut encore receler quelques mystères.

À titre d'exemple et en guise de conclusion à ce complément, nous résumons brièvement une expérience de diffraction électronique ultrarapide résolue dans le temps qui a été menée par Siwick *et al.* dans les laboratoires du groupe de R. J. Dwayne Miller à l'Université de Toronto. Cette expérience, dont les résultats ont été publiés en 2003 dans la revue *Science*, s'intéresse à la fusion de l'aluminium induite par impulsions laser ultrabrèves [152].

Lors de la fusion d'un matériau, les fluctuations responsables des changements de densité menant collectivement à la transition de phase se produisent sur des échelles spatiale et temporelle suffisamment longues pour effacer tous les détails de niveau atomique. Avec l'aide d'un laser femtoseconde,

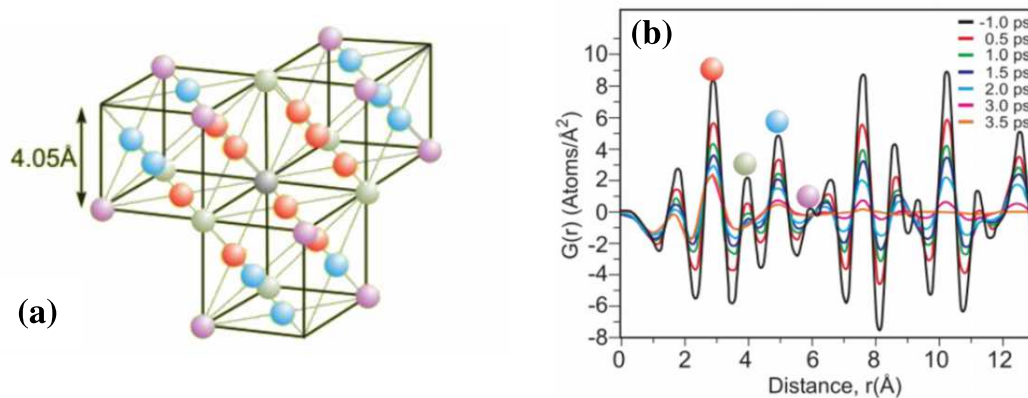


Figure 6.7 – Vision à l'échelle atomique de la fusion de l'aluminium polycristallin induite par une impulsion laser femtoseconde. (a) Structure cubique à faces centrées (fcc) de l'aluminium à l'état solide. (b) Évolution de la fonction de corrélation par paires,  $G(r)$ , telle que mesurée par diffraction électronique ultrarapide (voir texte). Physiquement, la fonction  $G(r)$  représente la déviation de la densité atomique par rapport à sa valeur moyenne. Après 3.5 ps, l'ordre à longue distance caractéristique de la phase solide est perdu ; l'échantillon présente seulement des corrélations à courte distance, ce qui est typique de la phase liquide. Les couleurs identifiant les différents pics de  $G(r)$  font référence à la sous-figure (a). Figure tirée de [145].

il est toutefois possible de chauffer localement la matière au-delà du point de fusion plus rapidement que son taux de relaxation thermique, qui est généralement de l'ordre de quelques picosecondes. On obtient alors un volume de matière dans un état extrême, qui s'avère un échantillon intéressant pour l'étude du phénomène de fusion.

Dans un article publié dans *Physical Review Letters* au début des années 2000, Guo *et al.* ont étudié la fusion de l'aluminium induite par impulsions femtosecondes [60]. Plus spécifiquement, à l'aide d'impulsions laser d'une durée de 130 fs à 800 nm, ils ont induit la fusion d'un échantillon très mince d'aluminium (Al) polycristallin et en ont monitoré l'évolution temporelle en mesurant, à différents intervalles dans la transition, la constante diélectrique de l'échantillon. À l'aide de cette mesure optique, ils ont observé l'apparition de propriétés diélectriques s'apparentant à celles d'un liquide sur une échelle de temps de l'ordre de 500 fs. Il a alors été conjecturé que la fusion se produisait sur cette échelle temporelle, qui est plus courte que le temps de relaxation thermique des électrons par diffusion phononique (de l'ordre de quelques picosecondes). Guo *et al.* ont proposé que contrairement à ce qui était généralement admis, la transition de phase était plutôt de nature non thermique, et qu'elle était causée par un affaiblissement de la structure du réseau cristallin dû à une forte excitation électronique.

La méthode d'analyse de Guo *et al.* est basée sur une mesure optique. Par conséquent, elle n'a pas la résolution nécessaire pour sonder ce qui se produit dans l'échantillon à l'échelle atomique. Afin de proposer un nouveau point de vue sur le phénomène, Siwick *et al.* ont conduit quelques années plus tard une expérience de diffraction électronique ultrarapide résolue dans le temps visant à observer la fusion induite par laser dans l'aluminium polycristallin [152]. En utilisant des conditions d'excitation

très similaires à celles utilisées précédemment par Guo *et al.*, ils ont monitoré la fusion du volume excité en obtenant une série de figures de diffraction à l'aide d'impulsions d'électrons d'une durée de 600 fs contenant 6000 charges par impulsion. Cette technique leur a permis de caractériser l'évolution temporelle de la fonction de corrélation par paires dans l'échantillon (voir figure 6.7). Les résultats obtenus montrent que la perte d'ordre à longue distance et l'émergence d'une structure liquide se produisent sur un temps de l'ordre de 3.5 ps, qui est caractéristique du couplage électron-phonon dans l'aluminium. Contrairement à l'explication proposée par Guo *et al.*, l'expérience de Siwick *et al.* a démontré que même dans la limite de forte excitation laser, la fusion de l'aluminium est bel et bien de nature thermique.

En conclusion, cet exemple illustre bien l'importance de l'information que peut fournir l'étude d'un phénomène physique via la technique de la diffraction électronique ultrarapide. En comparaison avec les méthodes optiques, qui sondent la réponse électronique de la matière, la diffraction électronique permet d'aller chercher de l'information quantitative détaillée sur la position des noyaux, offrant ainsi un portrait du phénomène à l'échelle de l'atome.

## Chapitre 7

# Génération d'impulsions d'électrons ultrabrèves, partie II : accordabilité

Article original :

**Tunable high-repetition-rate femtosecond few-hundred-keV electron source**

Vincent Marceau<sup>1</sup>, Pascal Hogan-Lamarre<sup>1</sup>, Thomas Brabec<sup>2</sup>, Michel Piché<sup>1</sup> et Charles Varin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centre d'Optique, Photonique et Laser, Université Laval, Québec, Québec, Canada.

<sup>2</sup>Center for Research in Photonics, University of Ottawa, Ottawa, Ontario, Canada

Référence : Journal of Physics B 48, 045601 (2015).

© 2015 The Institute of Physics (§7.2–§7.8)

## 7.1 Avant-propos

Au chapitre précédent, nous avons vu que des impulsions laser de polarisation radiale avec quelques centaines de gigawatts de puissance peuvent être utilisées pour produire des impulsions d'électrons ultrabrèves dans la fenêtre énergétique adéquate pour les expériences d'imagerie atomique et moléculaire. L'objectif du présent chapitre est de pousser un peu plus loin la preuve de concept avancée au chapitre précédent. Plus particulièrement, nous étudions la versatilité du schéma d'accélération directe par champ longitudinal pour la production d'impulsions d'électrons femtosecondes, de même que son applicabilité dans le cadre d'expériences de diffraction électronique ultrarapide.

À nouveau, ce chapitre est constitué de deux parties. La première partie (sections §7.2 à §7.8) correspond à un article qui a été publié dans la revue *Journal of Physics B* en janvier 2015 [105]. Elle est par conséquent rédigée en anglais, à l'exception d'une version française du résumé. Quelques résultats supplémentaires sont ensuite présentés à la section §7.9, qui agit à titre de complément.

## 7.2 Résumé

À l'aide de simulations de type particle-in-cell, nous démontrons la possibilité de générer des impulsions d'électrons femtosecondes à quelques centaines de keV d'énergie en focalisant des impulsions laser millijoules de polarisation radiale dans un gaz de faible densité. En optimisant les paramètres du système, nous montrons que la fenêtre d'énergie allant de 100 à 300 keV, caractéristique des expériences de diffraction électronique ultrarapide, est entièrement accessible. De concert avec le développement récent de sources laser à haute puissance opérant à des taux de répétition de 1 kHz et plus, la technique proposée a le potentiel d'amener les expériences de diffraction électronique ultrarapide actuelles jusqu'à une résolution temporelle de l'ordre de la femtoseconde.

## 7.3 Abstract

Using three-dimensional particle-in-cell simulations, we demonstrate that femtosecond few-hundred-keV electron pulses can be produced at a high repetition rate by tightly focusing few-mJ few-cycle radially polarized laser pulses in a low density gas. In particular, we show that the laser pulse parameters and gas density can be optimized to cover the full 100–300 keV energy window that characterizes ultrafast electron diffraction imaging experiments. The active development of high-power laser sources promises routine operation at 1 kHz and above, allowing time-resolved electron diffraction on the femtosecond time scale.

## 7.4 Introduction

The advent of ultrafast science has allowed scientists to observe physical processes in matter on the molecular, atomic, and electronic time scales. For example, femtosecond lasers have made possible

the study of molecular structure changes and chemical bond dynamics that happen during chemical reactions [192]. In the last decade, the successful generation of XUV attosecond pulses has pushed the boundaries of ultrafast science into the attosecond domain, allowing the real-time observation of atomic-scale electronic processes for the first time [84].

Besides ultrashort light sources, ultrashort pulses of electrons occupy an important place in ultrafast science. At relativistic energies, they can be used to drive ultrashort bursts of x rays [49] or seed staged laser-driven plasma accelerator setups [74, 113]. At subrelativistic energies, their large scattering cross section in comparison to that of x rays makes them efficient probes in atomic and molecular imaging techniques [145]. Electron pulses with energies of the order of 100 keV have been successfully used in time-resolved ultrafast electron diffraction (UED) experiments to investigate physical processes on a sub-picosecond time scale with sub-nanometer spatial resolution [55, 64, 144].

In conventional UED experiments, the electrons are generated from a photocathode illuminated by a femtosecond laser pulse and are subsequently accelerated by a static voltage ramp [145]. After this initial acceleration stage, a rapid spatiotemporal expansion of the electron pulse occurs under the effect of the velocity spread and repulsive Coulomb force. To achieve a high temporal resolution at the sample while maintaining a high brightness, the electron pulse has to be longitudinally recompressed down to its initial length [164]. With the current photocathode and static accelerator technology, the initial duration of the electron pulse is intrinsically limited to approximately 70 fs by the photoemission process [1]. Temporal durations close to this value at the sample have been achieved using a radio-frequency (rf) cavity to invert the linear velocity chirp and recompress the electron bunch [173]. However, to reach a temporal resolution of the order of a femtosecond or even less, alternative electron sources that allow for shorter intrinsic initial durations have to be developed. Techniques based on the use of rf electron guns instead of static accelerators have been proposed to reduce the pulse duration to 10 fs, yet at the cost of increasing the electron energy to a few MeV [63]. Due to the reduced scattering cross-section of relativistic electrons and other experimental considerations, electron energies in the 100–300 keV window are generally preferred [172].

In the last few years, laser-driven electron accelerators have been proposed as an alternative electron source in UED experiments [69, 167, 168]. Using a laser-based acceleration mechanism has several potential advantages for UED applications [69]: (i) the short wavelength of the accelerating field may lead to electron bunches with initial durations of the order of 10 fs or less; (ii) there is an intrinsic synchronization between the electron probe and the laser pump; (iii) using a gas medium, the electron source is self-regenerating and can thus be used for experiments at high repetition rates. In [167], 350-keV electron bunches were produced from high-intensity laser-solid interaction and compressed down to 500 fs at the sample. Laser wakefield accelerators, which have been very successful in generating electrons at energies above 100 MeV [43], can also be scaled down to lower energies. In [69], 100-keV bunches with a duration possibly under 100 fs, although not measured, were generated at 0.5 kHz repetition rate from laser wakefield acceleration in plasmas with a density downramp. Bunches with a duration as short as 15 fs have been reported from subrelativistic wakefields in a

dispersion-dominated regime, but in the 5–10 MeV energy range [17]. Similarly, sub-femtosecond electron pulses are predicted from sharp wave breaking in plasmas with upramp density profiles, but at energies above 10 MeV [90].

In this paper, we propose the design of a tunable laser-driven femtosecond electron source that operates in the few-hundred-keV energy range. This work is based on a recent contribution, in which we highlighted the possibility of generating femtosecond electron pulses by tightly focusing few-mJ few-cycle radially polarized laser pulses in a low density gas [106]. Using three-dimensional test-particle and particle-in-cell (PIC) simulations, we investigate in detail the tunability and applicability of this approach. In particular, we show that the laser pulse parameters and gas density can be optimized to cover the full 100–300 keV energy window, ideal for UED imaging experiments. Since this acceleration scheme is based on the use of few-millijoule-class laser systems, operation at high repetition rates of the order of 1 kHz is conceivable with the actual laser technology.

This paper is divided as follows. In Sec. §7.5, the numerical model is first thoroughly described. In the first part of Sec. §7.6, an extensive series of test-particle simulations is performed to analyze the effects of the driving laser parameters on the generation of ultrashort electron pulses. We show that the laser power, pulse duration, and beam waist size can be used as tuning knobs to control the electron bunch properties. Optimized case studies with hydrogen and heavier species are then presented in the second part of Sec. §7.6 using a three-dimensional PIC framework that includes the complete ionization dynamics from a neutral gas. Ultimately in Sec. §7.7, we show that with an appropriate filtering technique, electron pulses produced at a kHz repetition rate with the method we propose would have a coherence length and a flux both sufficient to perform time-resolved electron diffraction. Spatiotemporal broadening due to propagation to a distant target is also analyzed. Our conclusions are summarized in Sec. §7.8.

## 7.5 Numerical simulations

We consider a simple configuration in which an ultrashort radially polarized laser pulse is tightly focused in a dilute gas of uniform density  $n_0$  (see Fig. 7.1). Upon its arrival at the focal plane, electrons are released by ionization and are subsequently accelerated by the longitudinal electric field component of the laser pulse. A similar accelerator design was recently used experimentally by Payeur *et al.* [126]. In their setup, a collimated radially polarized input beam was produced from a polarization state converter and then focused in a gas chamber by a high-aperture parabola.

We analyze the acceleration dynamics using three-dimensional test-particle and particle-in-cell simulations. All numerical simulations incorporate an exact mathematical model of a radially polarized laser pulse. We describe these elements in the following sections.



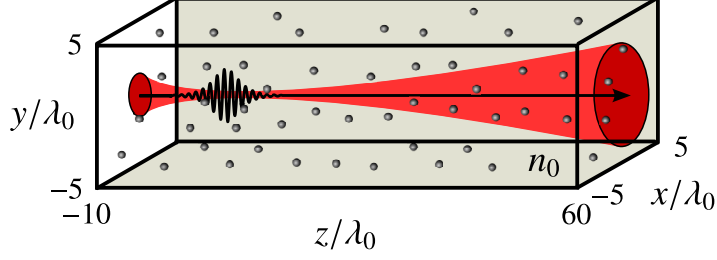


Figure 7.1 – Schematic illustration of the acceleration scheme.

### 7.5.1 Exact solution of a radially polarized $\text{TM}_{01}$ pulse

Ultrashort and tightly focused laser pulses require a mathematical description that extends beyond the conventional paraxial and slowly-varying-envelope approximations. Moreover, in the specific context of electron acceleration by radially polarized laser beams, it was recently shown that even under moderate focusing conditions, the paraxial approximation fails at describing correctly the dynamics of electrons that are slightly off the optical axis [107, 109]. For our simulations to be as accurate as possible, we therefore use an exact solution to Maxwell's equations for the driving laser pulse.

We consider the lowest-order radially polarized laser field, namely the transverse magnetic  $\text{TM}_{01}$  pulse. Among the different methods proposed to obtain an exact mathematical description of its electromagnetic field (e.g., Lax series expansion [137, 180], Stratton-Chu integrals [21], etc.), one of the most convenient comes from combining the complex source/sink model with the Hertz vector potentials. This strategy, presented in detail by April in [7], yields a simple yet rigorous closed-form solution for a  $\text{TM}_{01}$  pulsed beam. Following his approach, the nonzero field components of an isodiffracting  $\text{TM}_{01}$  pulse travelling in the forward  $z$  direction (beam waist at  $z = 0$ ) are given by

$$E_r(\mathbf{r}, t) = \frac{3\Psi_0 \sin \tilde{\theta} \cos \tilde{\theta}}{\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(0)}}{\tilde{R}^2} + \frac{G_+^{(1)}}{c\tilde{R}} + \frac{G_-^{(2)}}{3c^2} \right), \quad (7.1)$$

$$E_z(\mathbf{r}, t) = \frac{\Psi_0}{\tilde{R}} \left[ \frac{(3 \cos^2 \tilde{\theta} - 1)}{\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(0)}}{\tilde{R}} + \frac{G_+^{(1)}}{c} \right) - \frac{\sin^2 \tilde{\theta}}{c^2} G_-^{(2)} \right], \quad (7.2)$$

$$B_\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\Psi_0 \sin \tilde{\theta}}{c\tilde{R}} \left( \frac{G_-^{(1)}}{c\tilde{R}} + \frac{G_+^{(2)}}{c^2} \right), \quad (7.3)$$

The physical  $\mathbf{E}$  and  $\mathbf{B}$  fields are obtained by taking the real part of these expressions. Equations (7.1)–(7.3) are expressed in cylindrical coordinates  $(r, \theta, z)$ ;  $E_0$  is a constant amplitude,  $c$  is the speed of light in vacuum,  $\tilde{R} = [r^2 + (z + ia)^2]^{1/2}$ ,  $\cos \tilde{\theta} = (z + ia)/\tilde{R}$ , and  $G_\pm^{(n)} = \partial_t^n [f(\tilde{t}_-) \pm f(\tilde{t}_+)]$  with  $\tilde{t}_\pm = t \pm \tilde{R}/c + ia/c$ . The parameter  $a$  is a real and positive constant called the confocal parameter; it is identical for all frequency components in an isodiffracting beam. The function  $f(t)$  is the inverse Fourier transform of the frequency spectrum of the pulse, which we assume to be Poisson-like [31]:

$$F(\omega) = 2\pi e^{-i\phi_0} \left( \frac{s}{\omega_0} \right)^{s+1} \frac{\omega^s e^{-s\omega/\omega_0}}{\Gamma(s+1)} H(\omega), \quad (7.4)$$

where  $s$  is a real and positive constant related to the pulse duration,  $\phi_0$  is the constant carrier-envelope pulse phase,  $\omega_0 = ck_0$  is the frequency of maximum amplitude,  $\Gamma(x)$  is the gamma function, and  $H(x)$

is the Heaviside step function. In the temporal domain, this gives

$$\partial_t^n f(t) = e^{-i\phi_0} \frac{\Gamma(s+n+1)}{\Gamma(s+1)} \left(\frac{i\omega_0}{s}\right)^n \left(1 - \frac{i\omega_0 t}{s}\right)^{-(s+n+1)}. \quad (7.5)$$

From an experimental viewpoint, it has been shown that the fields given by Eqs. (7.1)–(7.3) may be produced by focusing a collimated radially polarized input beam with a parabolic mirror of large aperture [9].

To characterize the  $\text{TM}_{01}$  pulse described above, we rely on four parameters, namely the normalized confocal parameter  $k_0 a$ , the spectral parameter  $s$ , the phase  $\phi_0$ , and the average power  $P$ . The parameter  $k_0 a$  can be used to characterize the focusing strength of the beam. It is monotonically related to the beam waist size  $w_0$ , which can be estimated by

$$k_0 w_0 \approx \left[ 2k_0 a \left( \frac{s}{s+3/2} \right) \right]^{1/2}, \quad (7.6)$$

a relation that becomes asymptotically exact when  $k_0 a \gg 1$  [189]. The full-width-at-half-maximum (FWHM) pulse duration increases monotonically with the parameter  $s$ . Since Eqs. (7.1)–(7.3) reduce to the fields of a paraxial  $\text{TM}_{01}$  Gaussian pulse [48] in the limit  $s \gg 1$  and  $k_0 a \gg 1$ , we can use the asymptotically exact relation

$$T_{\text{fwhm}} \approx \frac{2\sqrt{2s \ln 2}}{\omega_0} \quad (7.7)$$

to estimate the FWHM pulse duration. We calculate the power carried by the pulse by performing the surface integral of the average Poynting vector over the beam waist plane at  $t = 0$  [175]:

$$P = \int_S \mathbf{S}_{\text{av}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_z dS = \frac{1}{2\mu_0} \int_S \text{Re}\{E_r B_\phi^*\} dS, \quad (7.8)$$

where  $\text{Re}\{\dots\}$  denotes the real part and  $\mu_0$  is the vacuum permeability. The dominant wavelength  $\lambda_0 = 800$  nm is used in the cases studied in this work. Figure 7.2 illustrates the temporal and spatial profile of some pulses resulting from various combinations of  $k_0 a$  and  $s$  that are used in Sec. §7.6.

### 7.5.2 Three-dimensional particle-in-cell simulations

All simulations of the acceleration dynamics are performed using the open-source relativistic PIC code Epoch [26]. Test-particle simulations with noninteracting and initially free electrons, which are much less computationally expensive, are realized by running the code with all space-charge effects turned off. For regular interacting-electrons PIC simulations, multiphoton, tunnel, and barrier-suppression ionization are taken into account [87], as well as the motion of the ions and its effect on the electron trajectories. At the densities we consider, which are many orders of magnitude below the critical density, collisional effects are expected to be negligible and are not included in the model.

We implement the fields of the incident  $\text{TM}_{01}$  pulse in Epoch using the scattered-field formulation [160]. This technique is based on the linearity of Maxwell's equations and involves a decomposition of the total  $\mathbf{E}$  and  $\mathbf{B}$  fields into known incident fields and unknown scattered fields. The

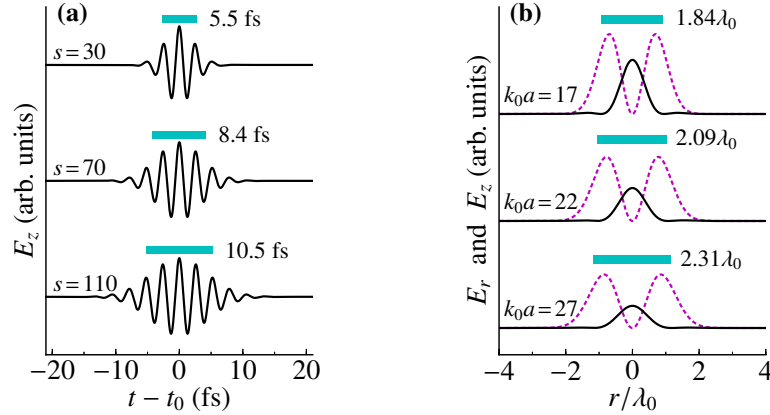


Figure 7.2 – (a) Temporal profile of  $E_z$  at the origin for  $k_0a = 20$  and three different values of  $s$ . The scale bars correspond to  $T_{fwhm}$  calculated from (7.7). (b) Spatial profile of  $E_z$  (solid curves) and  $E_r$  (dashed curves) in the beam waist plane at  $t - t_0 = 0$  for  $s = 70$  and three different values of  $k_0a$ . The scale bars correspond to  $2w_0$  calculated from (7.6). The laser dominant wavelength is set to  $\lambda_0 = 800$  nm.

FDTD scheme in the code only tracks the scattered fields, which result from charged particles in motion; the incident  $TM_{01}$  fields are computed at the position of each marker using Eqs. (7.1)–(7.3).

The numerical simulations are carried on a cartesian mesh of size  $200 \times 200 \times 1400$  with  $N_\lambda = 20$  grid points per wavelength, spanning the region  $x, y \in [-5\lambda_0, 5\lambda_0]$  and  $z \in [-10\lambda_0, 60\lambda_0]$  (see figure 7.1). Each run starts with  $5 \times 10^8$  markers randomly distributed in the simulation domain. The laser pulse is initially outside the simulation domain; a delay is added for it to reach the beam waist plane ( $z = 0$ ) at  $t_0 = 80$  fs. We have observed that increasing the grid resolution to  $N_\lambda = 30$  does not significantly alter the results.

The interaction of the  $TM_{01}$  pulse with the particles located in the focal region typically results in the acceleration of two principal electron jets. A first annular jet is formed by electrons that are accelerated radially away from the optical axis by the radial electric field component. These electrons rapidly leave the simulation domain; their properties are not analyzed. The second jet, which is the object of our analysis in the next sections, is accelerated forward along the optical axis, principally under the direct action of the longitudinal electric field component. More specifically, the electrons are accelerated by staying in phase with the laser field over a certain distance. This mechanism, termed direct longitudinal electron acceleration in radially polarized laser beams, is discussed in detail in [106, 175].

## 7.6 Influence of the laser parameters on the electron bunch properties

In [106], the formation of ultrashort electron pulses was presented for the single set of parameters  $P = 300$  GW,  $k_0a = 20$ ,  $s = 70$ , and  $\phi_0 = \pi$ . For these specific values, a 1.1 fs electron pulse at

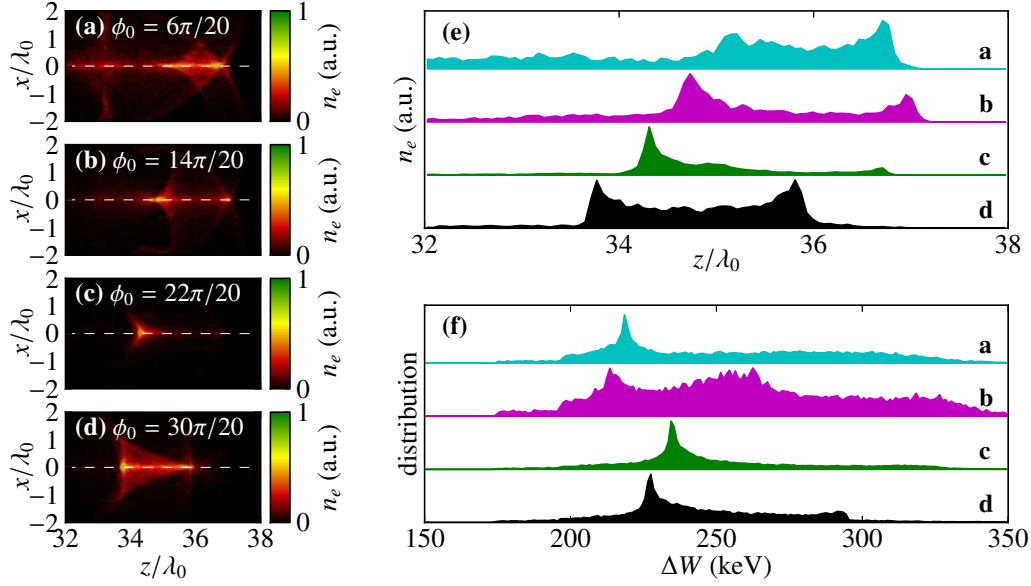


Figure 7.3 – Electron bunches produced after the interaction of a  $P = 300$  GW,  $k_0 a = 20$ , and  $s = 70$  laser pulse with a target of free and noninteracting electrons (test-particle simulations). (a)–(d) Electron number density  $n_e$  in the  $(x, z)$  plane for four different values of  $\phi_0$ ; the dashed curve indicates the optical axis. (e) Electron number density along the optical axis and (f) kinetic energy distribution for the cases shown in (a)–(d). The snapshots are taken at  $t - t_0 = 120$  fs. Only the electrons with kinetic energy  $\Delta W > 50$  keV located in the  $(x, z)$  region shown in (a)–(d) and within a slice of thickness  $\lambda_0$  centered at  $y = 0$  are considered to obtain the distribution functions.

$\Delta W = 240$  keV with  $\text{fwhm}(\Delta W)/\Delta W \approx 5\%$  was obtained from PIC simulations with hydrogen at density  $n_0 = 3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . In this section, we investigate the influence of the driving laser parameters (phase, power, focusing strength, and pulse duration) on the properties of the accelerated electron pulses. In the first place, we perform an extensive series of test-particle simulations in order to gain some insights on the effect of each parameter. Some optimized scenarios are then studied in the full PIC framework with hydrogen and heavier species.

### 7.6.1 Test-particle simulations

Since they are less computationally expensive than particle-in-cell simulations, test-particle simulations are a valuable tool to undertake an extensive study of the parameter space. Moreover, as shown in [106], their results are very representative of those to be expected with an hydrogen target at low density.

In the first place, we investigate the effect of the carrier-envelope phase  $\phi_0$ . In Fig. 7.3, the number density profile and energy distribution are illustrated for electron pulses produced with four different values of  $\phi_0$  at  $P = 300$  GW,  $k_0 a = 20$ , and  $s = 70$ . The snapshots are taken at  $t - t_0 = 120$  fs, shortly after the acceleration process is terminated. As shown in Fig. 7.3, the acceleration dynamics are rather sensitive to the laser phase. Quasi-monoenergetic and isolated electron bunches are only observed at

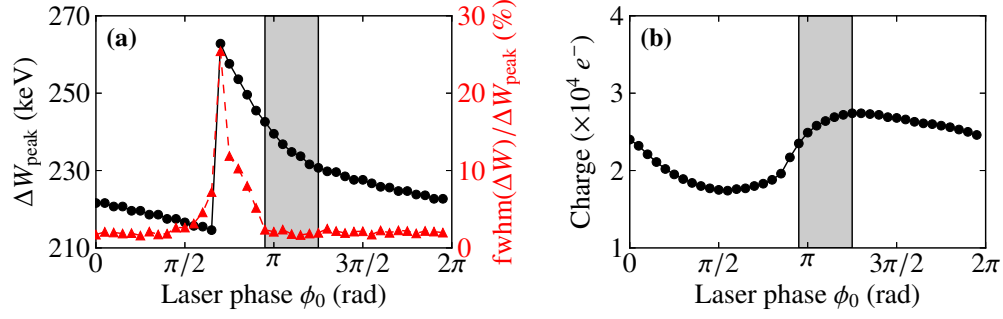


Figure 7.4 – Variation of (a) the position of the main peak of the kinetic energy distribution (circles, left axis) and its FWHM width (triangles, right axis) and (b) the estimated bunch charge as a function of the laser pulse phase  $\phi_0$ . The shaded region identifies the phases with which quasi-monoenergetic and isolated femtosecond bunches are observed. The laser parameters are  $P = 300$  GW,  $k_0a = 20$ , and  $s = 70$ . The charge is obtained by counting up the electrons with  $\Delta W > 50$  keV located within a cylinder of radius  $\lambda_0$  extending over the  $z \in [32\lambda_0, 38\lambda_0]$  interval. The results are obtained at  $t - t_0 = 120$  fs.

specific values of  $\phi_0$  (see for example case *c* in Fig. 7.3). In Fig. 7.4, the position of the main peak of the energy distribution and its FWHM width, as well as the estimated charge of the electron bunch (assuming  $n_0 = 10^{23} \text{ m}^{-3}$ ) are shown for 40 integer multiples of  $\pi/20$ . The sudden jump observed in  $\Delta W_{\text{peak}}$  around  $\phi_0 = 15\pi/20$  is caused by a second maximum that progressively develops in the energy distribution as the phase is increased (see case *b* in Fig. 7.3).

From these results, it appears that phase optimization is required to produce isolated electron bunches with a narrow energy spread. For the case shown in Fig. 7.4, the optimal phase range is indicated by the shaded region. This observed phase sensitivity is a consequence of direct longitudinal acceleration and distinguishes the dynamics from phase-independent ponderomotive acceleration [159]. From an experimental perspective, the carrier-envelope phase of the laser therefore has to be tuned and stabilized. Current state-of-the-art phase-stabilized millijoule lasers are now able to function with a precision of 0.25 rad [33]. This stability should be enough to guarantee a high-repetition-rate operation in the optimal phase window shown in Fig. 7.4.

Secondly, Fig. 7.5 shows the properties of the electron bunch as the power of the laser pulse is increased, keeping  $k_0a = 20$  and  $s = 70$  constant. For each value of the laser power, we optimized the phase  $\phi_0$  over 40 different values; the optimal case, which we determined to be the best compromise in terms of energy and spatial dispersion of the electron pulse, is shown in Fig. 7.5.

Figure 7.5 shows that by tuning the laser power between 150 and 400 GW, it is possible to obtain femtosecond electron pulses with  $\text{fwhm}(\Delta W)/\Delta W_{\text{peak}} < 6\%$  within the 100–300 keV energy window, which is favored for UED experiments [172]. The estimated bunch charge also increases with the laser power, as a consequence of the fact that the high laser intensity zone in the focal region gets larger. While the energy spread gets fairly large at high laser power, we give evidence in Sec. §7.6.2 that it may be reduced by slightly increasing the beam waist size.

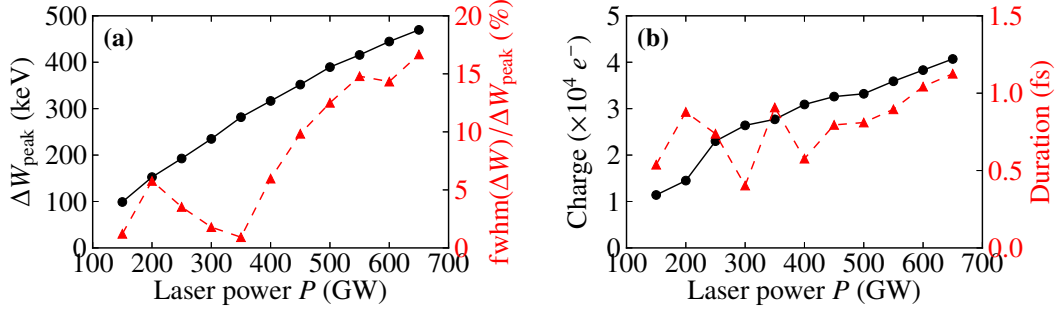


Figure 7.5 – Variation of (a) the position of the main peak of the kinetic energy distribution (circles, left axis) and its FWHM width (triangles, right axis) as well as (b) the estimated bunch charge (circles, left axis) and FWHM pulse duration (triangles, right axis) as a function of laser power. Each data point represents the optimal case among 40 different values of  $\phi_0$ . The laser parameters are  $k_0a = 20$  and  $s = 70$ . The charge is obtained by counting up the electrons with  $\Delta W > 50$  keV located within a cylinder of radius  $\lambda_0$  and length  $6\lambda_0$  approximately centered on the electron pulse. The results are obtained at  $t - t_0 = 120$  fs.

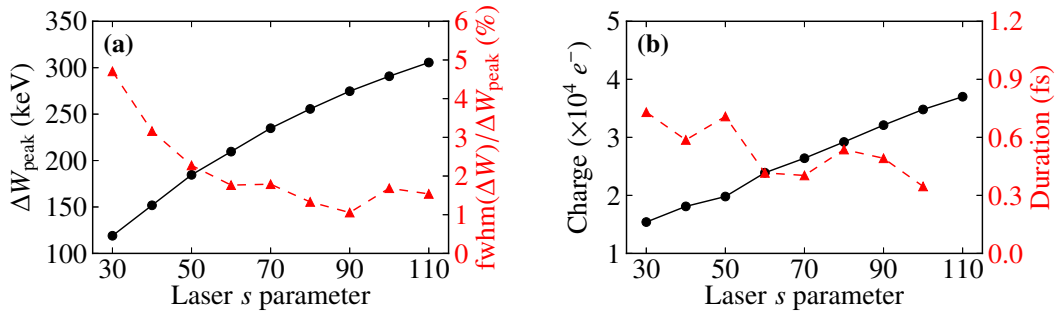


Figure 7.6 – Variation of (a) the position of the main peak of the kinetic energy distribution (circles, left axis) and its FWHM width (triangles, right axis) as well as (b) the estimated bunch charge (circles, left axis) and FWHM pulse duration (triangles, right axis) as a function of the spectral width parameter  $s$ . The other laser parameters are  $P = 300$  GW and  $k_0a = 20$ . Data analysis is performed as in Fig. 7.5.

Thirdly, we look at the influence of the pulse duration. Figure 7.6 shows the phase-optimized bunch properties as the spectral parameter  $s$  is tuned. The energy of the electrons is seen to increase with the laser pulse duration. This result is in agreement with previous one-dimensional studies and can be attributed to the pre-acceleration caused by the first optical cycles in the sub-relativistic regime [103, 186]. However, note that the electron bunch duration is not shown for  $s > 110$ . Under these conditions, the electrons form two separated bunches. Using ultrashort laser pulses therefore appears mandatory for the generation of isolated electron pulses.

Finally, the influence of the focusing strength on the phase-optimized bunch properties is shown in Fig. 7.7, where  $k_0a$  is varied while holding  $P = 300$  GW and  $s = 70$  constant. The peak of the energy distribution moves toward lower energies as  $k_0a$  is increased. This is a consequence of the fact that the amplitude of the longitudinal electric field component, which drives the acceleration, decreases.

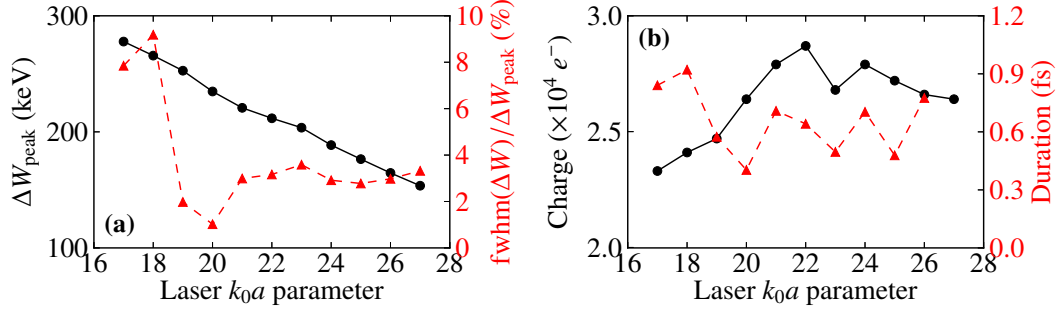


Figure 7.7 – Variation of (a) the position of the main peak of the kinetic energy distribution (circles, left axis) and its FWHM width (triangles, right axis) as well as (b) the estimated bunch charge (circles, left axis) and FWHM pulse duration (triangles, right axis) as a function of the normalized confocal parameter  $k_0a$ . The other laser parameters are  $P = 300$  GW and  $s = 70$ . Data analysis is performed as in Fig. 7.5.

On the other hand, weaker focusing conditions imply a larger beam waist size. This explains why the accelerated charge first increases with  $k_0a$ , but eventually diminishes as the longitudinal electric field weakens. According to Fig. 7.7, the best results in terms of energy spread and pulse duration are obtained around  $k_0a = 20$ . It should be stressed that this optimal value of  $k_0a$  depends on the  $P$  and  $s$  parameters.

## 7.6.2 Optimized case studies with hydrogen and heavier species

Now that test-particle simulations have provided us a good overview of the dynamics in parameter space, we turn to more realistic three-dimensional PIC simulations with full ionization dynamics. To illustrate the versatility and tunability of the proposed acceleration mechanism, we have optimized the electron bunch properties for three different values of the laser power, namely  $P = 150$  GW, 300 GW and 600 GW, for a given pulse duration ( $s = 70$ ). We first use an hydrogen target of initial density  $n_0 = 3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ .

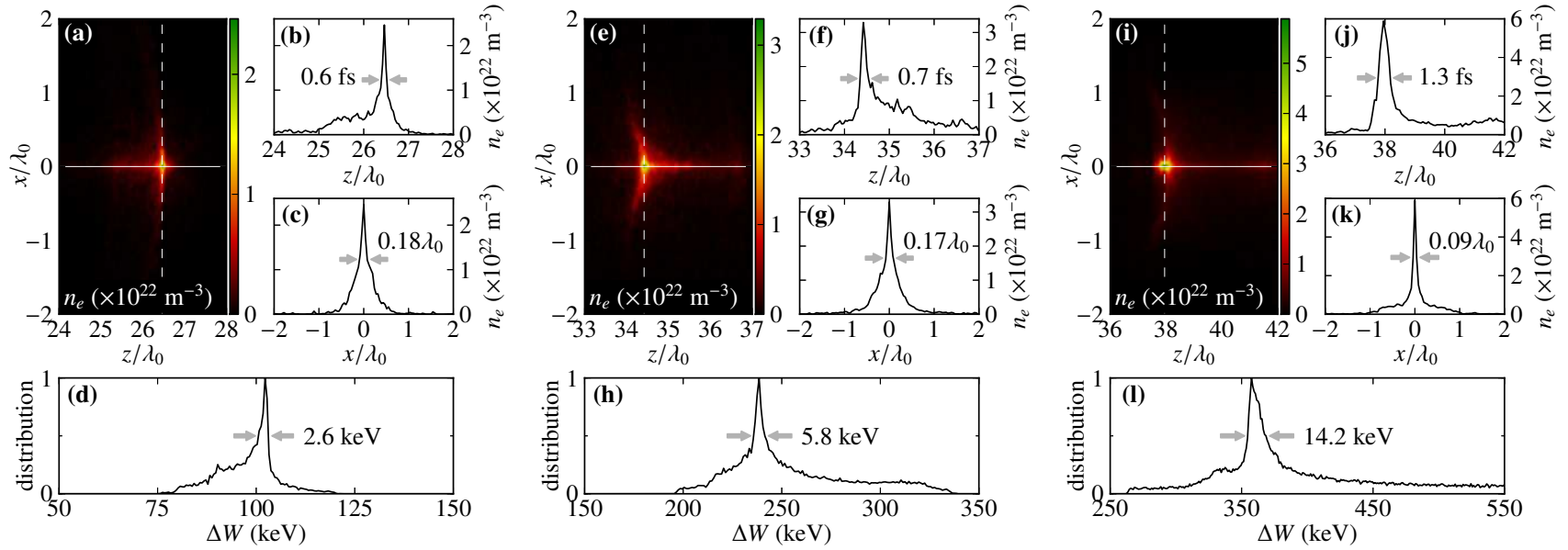


Figure 7.8 – Optimized case studies with hydrogen: characterization of an ultrashort electron bunch produced after the interaction of a (a)–(d)  $P = 150$  GW,  $k_0 a = 20$ ,  $s = 70$ ,  $\phi_0 = 17\pi/20$  laser pulse; (e)–(h)  $P = 300$  GW,  $k_0 a = 20$ ,  $s = 70$ ,  $\phi_0 = 22\pi/20$  laser pulse; (i)–(l)  $P = 600$  GW,  $k_0 a = 26$ ,  $s = 70$ ,  $\phi_0 = 23\pi/20$  laser pulse with an hydrogen target of density  $n_0 = 3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . Top left panels show the electron number density in the  $(x, z)$  plane. The solid and dashed white lines indicate the location of the  $z$  and  $x$  cuts shown in the top and middle right panels, respectively. Bottom panels show the kinetic energy distribution. The data analysis is performed as described in Fig. 7.3.



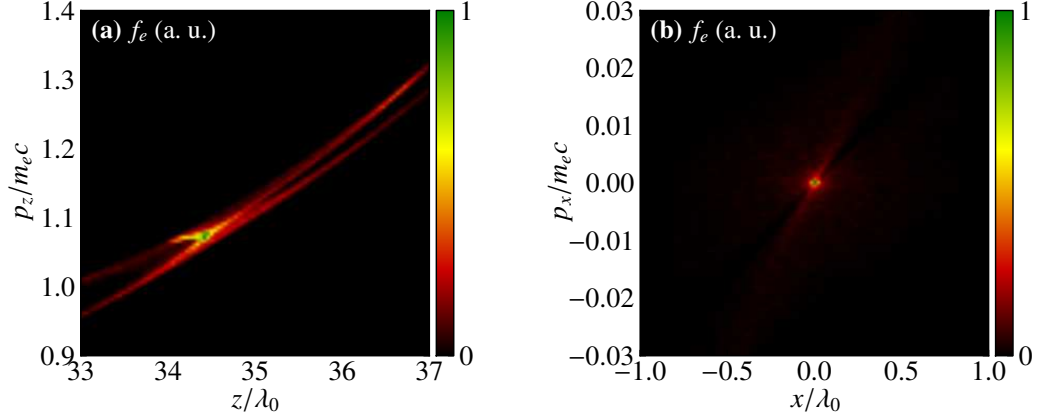


Figure 7.9 – Normalized (a) longitudinal and (b) transverse phase space distribution functions of the electron bunch obtained at  $P = 300$  GW and shown in figure 7.8(e)–(h).

The results of these three optimized case studies with hydrogen are shown in figure 7.8. The analysis reveals, in the three cases, the formation of ultrashort and quasi-monoenergetic electron bunches centered at 102 keV, 239 keV, and 358 keV, respectively. In all cases, the FWHM energy spread is inferior to 4%. At laser power of 150 GW and 300 GW, the on-axis number density profile shows a sub-femtosecond initial pulse duration. Counting up all the electrons with  $\Delta W > 50$  keV located in a cylinder of radius  $\lambda_0$  centered on the optical axis and extending over the  $z$  interval shown in figure 7.8(a), (e), and (i), we obtain a bunch charge estimate of 0.52 fC, 1.2 fC, and 2.7 fC, respectively. The percentage of those electrons that are located within the FWHM of the axial density profile is 15%, 14%, and 20%, respectively. We can also calculate the bunch normalized transverse and longitudinal emittance, given by

$$\epsilon_{n,\xi} = (1/m_e c) \sqrt{\langle \xi^2 \rangle \langle p_\xi^2 \rangle - \langle \xi p_\xi \rangle^2}, \quad (7.9)$$

where  $\xi = x$  for the transverse direction and  $\xi = z$  for the longitudinal direction [172]. These quantities estimate the volume occupied by the electrons in phase space. Performing the computation with all the electrons that were included in the charge calculation, we obtain  $\epsilon_{n,x} = 1.3 \times 10^{-3}$  mm·mrad and  $\epsilon_{n,z} = 1.8 \times 10^{-1}$  mm·mrad ( $P = 150$  GW),  $\epsilon_{n,x} = 3.7 \times 10^{-3}$  mm·mrad and  $\epsilon_{n,z} = 1.4$  mm·mrad ( $P = 300$  GW),  $\epsilon_{n,x} = 5.7 \times 10^{-3}$  mm·mrad and  $\epsilon_{n,z} = 6.1$  mm·mrad ( $P = 600$  GW). The six-dimensional phase space figure of merit, given by  $N_e / \epsilon_{n,x} \epsilon_{n,y} \epsilon_{n,z}$  where  $N_e$  is the number of electrons in the bunch [159], is respectively  $1.1 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$ ,  $3.8 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ , and  $8.3 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ . The longitudinal and transverse phase space density profiles are illustrated in figure 7.9 for the bunch corresponding to  $P = 300$  GW.

To investigate the influence of the target density, we have simulated the optimized case at  $P = 300$  GW with increasing initial densities. The results are shown in Fig. 7.10. For initial densities lower than  $3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ , the dynamics are dominated by direct acceleration and the results are very similar to those obtained in test-particle simulations. The bunch charge increases linearly, and the initial pulse duration remains slightly below 1 fs. Electrostatic Coulomb repulsion starts to play a noticeable role

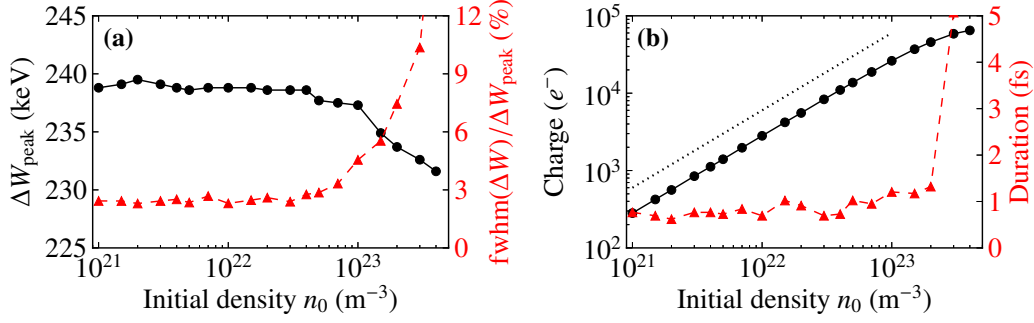


Figure 7.10 – Variation of (a) the position of the main peak of the kinetic energy distribution (circles, left axis) and its FWHM width (triangles, right axis) as well as (b) the estimated bunch charge (circles, left axis) and FWHM pulse duration (triangles, right axis) as a function of the initial hydrogen density  $n_0$ . The dotted black curve indicates a linear trend. The laser parameters are the same as in Figs. 7.8(e)–(h). Data analysis is performed as in Fig. 7.5.

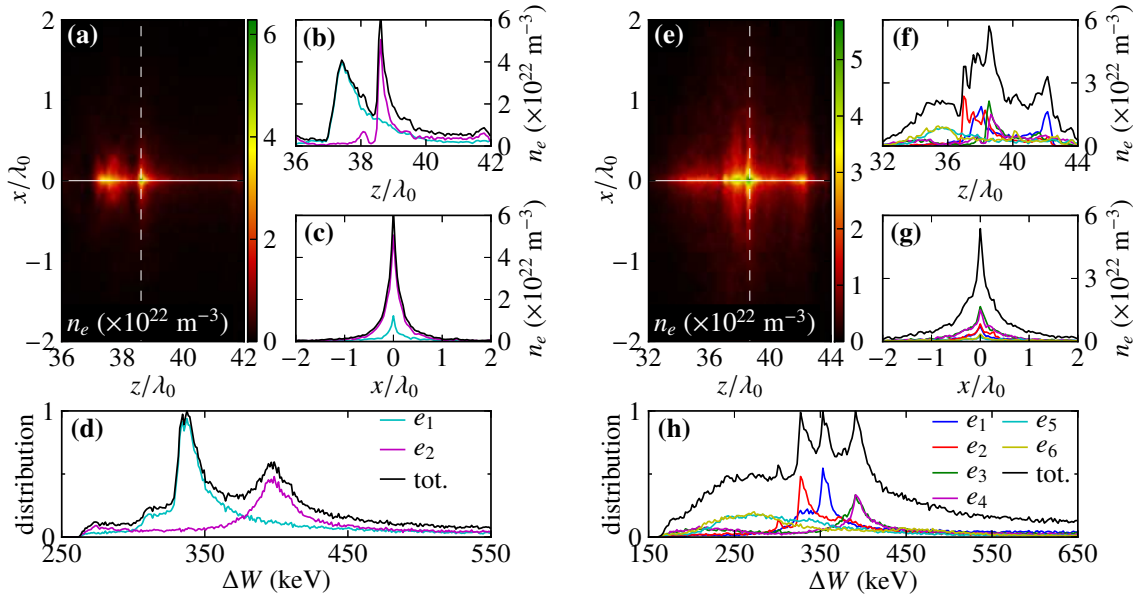


Figure 7.11 – Optimized case studies with (a)–(d) helium and (e)–(h) oxygen targets of density  $n_0 = 3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$  at laser power  $P = 600 \text{ GW}$ . See Fig. 7.8 for the signification of each panel. The laser parameters are identical to those used in Figs. 7.8(i)–(l). Curves labeled  $e_k$  correspond to the electron with the  $k$ -th lowest ionization energy.

at densities above  $3 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ ; an increase can be observed in the energy spread of the electron pulse. At densities above  $3 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$ , the dynamics are dominated by space-charge forces, which inhibit the direct acceleration of an electron pulse.

Finally, we investigate the possibility of using a gas target that consists of elements heavier than hydrogen. Figure 7.11 shows the results obtained with helium and oxygen at a laser power of 600 GW. The ionization energies are taken from [30]. From these results, it appears that elements with more than one electron might not be used to produce isolated and monoenergetic electron pulses. This is a

consequence of the ionization dynamics and a signature of the direct acceleration mechanism. Indeed, electrons with different ionization energies are released in the laser pulse at slightly different times. Their initial position in the electric field determines their kinetic energy gain, which manifests itself by several peaks in the energy distribution.

## 7.7 Application to ultrafast electron diffraction experiments

With the results obtained in Sec. §7.6, we have seen that the direct-field acceleration scheme appears to be appreciably versatile in the few-hundred-keV energy range. In this section, we take a second look at these results from the perspective of an application to UED experiments. More specifically, the issues of coherence, charge, and spatiotemporal broadening will be discussed.

A key property regarding UED experiments is the spatial coherence of the electron bunches. This is usually quantified by the transverse and longitudinal coherence lengths, denoted respectively  $L_T$  and  $L_z$ , which are the length scales over which pairs of atoms in the sample contribute coherently to the diffraction signal. They are defined by [115]:

$$L_T = \frac{\hbar}{\Delta p_x^{\text{loc}}} , \quad (7.10)$$

$$L_z = \frac{\langle p \rangle \hbar}{\Delta p_x^{\text{loc}} (\Delta p_x + \Delta p_x^{\text{loc}})} . \quad (7.11)$$

The observables  $(\Delta p_x)^2$  and  $(\Delta p_x^{\text{loc}})^2$  are respectively the total and local variance of the transverse electron momentum, and  $\langle p \rangle$  is the average momentum amplitude. These quantities can be computed from the  $N$ -electron phase-space distribution  $f_e(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  of the bunch [115]:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{N} \int d^3x d^3p p f_e(\mathbf{x}, \mathbf{p}) , \quad (7.12)$$

$$(\Delta p_x)^2 = \frac{1}{N} \int d^3x d^3p f_e(\mathbf{x}, \mathbf{p}) (p_x - \langle p_x \rangle)^2 , \quad (7.13)$$

$$(\Delta p_x^{\text{loc}})^2 = \frac{1}{N} \int d^3x d^3p f_e(\mathbf{x}, \mathbf{p}) (p_x - \langle p_x^{\text{loc}}(\mathbf{x}) \rangle)^2 , \quad (7.14)$$

where

$$N = \int d^3x d^3p f_e(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \int d^3x n(\mathbf{x}) , \quad (7.15)$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{1}{N} \int d^3x d^3p p_x f_e(\mathbf{x}, \mathbf{p}) , \quad (7.16)$$

$$\langle p_x^{\text{loc}} \rangle = \frac{1}{n(\mathbf{x})} \int d^3p p_x f_e(\mathbf{x}, \mathbf{p}) . \quad (7.17)$$

Note that while we have chosen the  $x$  cartesian coordinate as the transverse direction, the  $y$  coordinate could also have been used due to the cylindrical symmetry of the bunch.

For the three electron bunches obtained with hydrogen and shown in Fig. 7.8, we obtain  $L_T = 0.1$  nm and  $L_z = 5.5$  nm (150 GW),  $L_T = 0.04$  nm and  $L_z = 1.9$  nm (300 GW),  $L_T = 0.02$  nm and  $L_z = 1.0$  nm

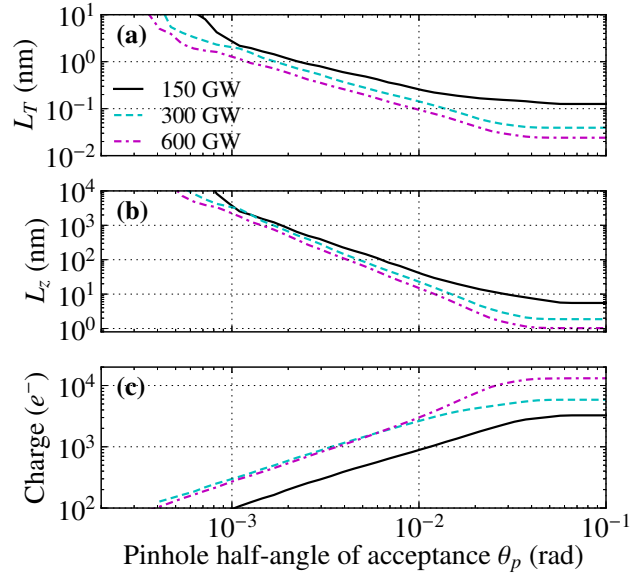


Figure 7.12 – (a)–(b) Coherence lengths and (c) number of electrons in the three bunches shown in figure 7.8 after being filtered by a pinhole, placed in the far field. An aperture with a small acceptance angle filters the most divergent electrons and, in turn, can increase the coherence length beyond the lower limit for UED ( $\sim 1$  nm).

(600 GW). These numbers are too low for UED; experiments usually require  $L_T > 1$  nm and  $L_z > w$ , where  $w \approx 20 - 40$  nm is the typical sample thickness [115, 145].

A simple approach that might be used to increase the transverse coherence length of the electron bunch is to filter it with a pinhole. To test the impact of filtering, we consider a linear projection of the electron trajectories from the distribution given in Fig. 7.8 onto a circular aperture located in the path of the electrons, in the far field. The coherence length is then calculated according to Eqs. (7.10)–(7.11) with the electrons that would go through the aperture, namely those for which  $\tan^{-1}[(p_x^2 + p_y^2)^{1/2}/p_z^2] < \theta_p$  where  $\theta_p$  is the pinhole half-angle of acceptance. Electrons that would miss the pinhole, essentially those whose transverse velocity is too large, are rejected. This approach neglects space-charge effects. Nevertheless, from the results obtained in Fig. 7.10, we believe that this first-order approach gives fair estimates for the initial gas density used in this analysis. Results are shown in Fig. 7.12.

From this simple calculation, we conclude that pinhole filtering can increase the transverse coherence length above 1 nm, achieving at the same time a longitudinal coherence length of the order of  $1 \mu\text{m}$ . However, this is at the cost of losing many electrons; the filtered bunches typically contain 300-500 electrons. Nevertheless, if the driving laser is operated at a kHz repetition rate, the number of remaining electrons per pulse would still provide a sufficient electron flux for time-resolved crystallography experiments (see, e.g., [15]). Note that other commonly used bunch manipulation techniques, such as beam focusing and magnification with a magnetic lens, might allow to increase the spatial coherence while preserving most of the electrons [145]. Since the bunch diameter is typically of the order of

$\lambda_0/2$  or less (figure 7.8), the ratio of the unfiltered bunch transverse coherence length over its diameter is of the order of  $10^{-4}$ , a value considered large enough for UED applications with electron beam magnification optics [14]. Note that this represents the worst case scenario where the bunch is not priorly filtered with a finite aperture. Using pinhole filtering, which increases  $L_T$  and reduces the bunch diameter, higher value of the coherence over diameter ratio could be obtained if needed. It is however unclear if magnetic lenses would preserve the femtosecond pulse duration; further numerical simulations on this issue are required. Finally, working with longer laser wavelengths would also provide a way to increase the charge per bunch (see Complement I in Sec. §7.9).

Another issue concerning UED applications is the propagation of the electron pulse to the sample. During the free-space propagation phase, spatiotemporal broadening of the electron pulse occurs due to the velocity dispersion and the repulsive Coulomb interaction. In this perspective, the use of a strongly focused, rapidly diverging, laser pulse (here  $z_R \sim 3\lambda_0$ ) might be an advantage, as it possibly allows placing the sample very close to the focal plane.

To study the spatiotemporal broadening of the electron bunch, we simulated the free-space propagation of the electron bunches shown in Fig. 7.8 for 1 ps using the moving window capability of Epoch. At intervals of 10 fs, we measured the FWHM of the longitudinal and transverse number density distribution, defined respectively by  $n_z(z) = \int n(\mathbf{x}) dx dy$  and  $n_x(x) = \int n(\mathbf{x}) dy dz$ , where the integral is performed over all the electrons located within a distance  $\lambda_0$  of the optical axis. The longitudinal extent was then converted to pulse duration by dividing by the mean axial velocity of the electrons included in it. Note that this analysis is slightly different from the spatial measurements performed in Fig. 7.8, which only correspond to cuts in the number density profile along the  $z$  and  $x$  axis. The results are shown in Fig. 7.13.

In all cases, the duration of the electron bunch is found to reach an asymptotic regime where it increases linearly, while its transverse FWHM width remains fairly constant. According to existing theoretical models, a linear increase of the longitudinal extent is predicted when the Coulomb repulsion becomes negligible [114]. Hence, for the electron bunches studied here, it appears that the longitudinal spreading is asymptotically dominated by the velocity dispersion. Pulse compression techniques that work by inverting the velocity chirp of the electron bunch would be useful to reach a minimal pulse duration at the sample [167, 173].

It is also worth mentioning that for the  $P = 300$  GW case, the pulse duration increase rate during free-space propagation is higher than the case previously reported in [106], which was obtained with the same laser parameters except for  $\phi_0$ . This is at first glance counterintuitive, since the case shown here features a narrower energy distribution than the case studied in [106]. However, careful data analysis reveals that the local variance of the axial momentum,  $(\Delta p_z^{\text{loc}})^2$  [obtained by replacing  $x$  by  $z$  in Eq. (7.17)], is smaller in [106]. According to the theory developed in Refs. [114, 116], the quantity  $(\Delta p_z^{\text{loc}})^2$  governs the temporal elongation of the pulse in the linear regime of negligible Coulomb interaction.

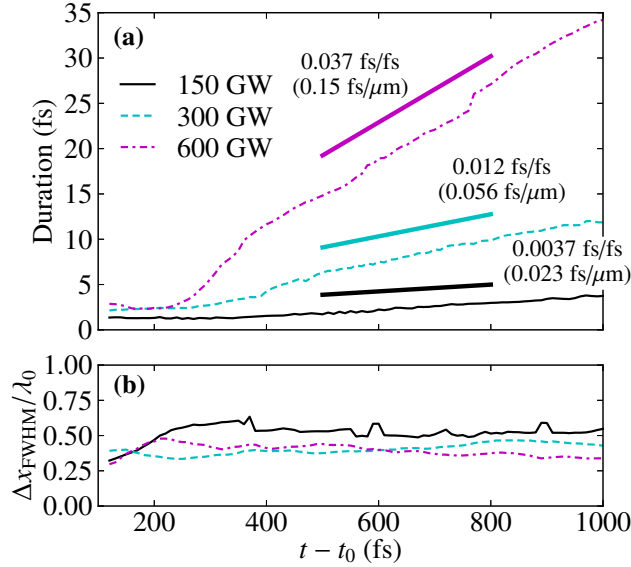


Figure 7.13 – Time evolution of the (a) pulse duration and (b) transverse FWHM width for the three bunches shown in figure 7.8 as they propagate freely for 1 ps. After an initial transient behavior, the pulse duration increases linearly; the rate of increase, obtained by linear fitting, is indicated in (a).

In summary, the electron pulses generated by the direct-field acceleration scheme would fill the requirements for UED applications provided a high enough repetition rate and a simple pinhole filtering. More sophisticated bunch manipulation devices used in state-of-the-art UED setups, such as bunch focusing and compression optics, could be useful in complementing our accelerator design.

## 7.8 Conclusion

We have investigated laser-driven electron acceleration by few-cycle radially-polarized laser pulses tightly focused in a low density gas. The all-optical direct-field acceleration mechanism allows controlling the quality of the electron bunches by tuning the optical driver parameters, while keeping the target form-free, conventional, and simple. More specifically, we have shown that by tweaking the laser power, pulse duration, and beam waist size, electron pulses of femtosecond (and even attosecond) initial duration can be accelerated and tuned over the 100–300 keV energy window with a percent-level energy spread. Combined with conventional electron optics, the proposed scheme—that can be operated at the highest repetition rate offered by current few-mJ laser sources—would be suitable for time-resolved UED, offering an avenue towards femtosecond time resolution.

From an experimental viewpoint, it should be noted that the parameters used in our analysis are within reach of the actual laser technology. Femtosecond Ti:sapphire laser systems with hollow core fiber compression schemes are currently able to produce sub-two-cycle laser pulses with mJ energy per pulse [3, 33, 110]. Beside being of table-top dimension, these lasers can be phase-stabilized with an rms precision of 250 mrad or less [3, 33] and operated at repetition rates up to 1 kHz [3, 110].

Recent developments in coherent combining with high-power fiber lasers are also promising [62]; in a near future, these sources might reach the required peak power and pulse duration at repetition rates above 100 kHz. Concerning the temporal characterization of few-femtosecond electron bunches, the recently demonstrated technique of optical-field-driven streaking, that potentially offers attosecond time resolution, is extremely promising [81]. Finally, while our numerical simulations were carried at 800 nm, using laser sources with longer wavelengths (e.g., 1.8  $\mu\text{m}$  [142]) would produce higher bunch charges, however at the cost of increasing the electron pulse duration.

Along atomic and molecular imaging, the proposed acceleration scheme is potentially a candidate for other applications. An example is electron injection in dielectric laser accelerators (DLAs), for which ultrashort electron pulses of nanometer-scale spot size are required [27, 127]. While single-grating DLAs are suited to nonrelativistic electrons [27], double-grating DLAs require relativistic injection energies [127]. Provided our acceleration scheme could be scaled to relativistic energies and pC charges, other applications would be possible, including table-top radiation sources [49, 163] as well as electron injection in plasma-wakefield accelerators [74, 113].

## 7.9 Complément I : Résultats à plus grande longueur d’onde

Dans l’article inséré dans ce chapitre, il est fait mention qu’il pourrait être possible d’augmenter la charge par impulsion en augmentant la longueur d’onde du laser. Dans ce complément, nous présentons quelques résultats préliminaires à propos de cette question.

Comme nous l’avons vu précédemment à la section §4.9, la dynamique d’une charge test dans le champ électromagnétique d’une impulsion  $\text{TM}_{01}$  dépend seulement des paramètres  $P$ ,  $k_0 a$ ,  $s$  et  $\phi_0$ . Par conséquent, les résultats des simulations de type particule test présentés à la section §7.6.1 de ce chapitre peuvent être facilement généralisés à plus grande longueur d’onde. Dans le paradigme de la charge test, si la longueur d’onde du laser est augmentée de  $\lambda_0$  à  $\lambda'_0$  à densité constante, la charge par paquet d’électrons devrait augmenter comme  $(\lambda'_0/\lambda_0)^3$ , tandis que sa durée devrait augmenter d’un facteur  $\lambda'_0/\lambda_0$ . Dans la réalité, cela peut toutefois être différent étant donné que certains phénomènes dépendent de la longueur d’onde. Par exemple, on sait que le taux d’ionisation dépend de la valeur absolue du champ électrique, qui varie en fonction de la longueur d’onde lorsqu’on travaille à puissance constante.

Afin de vérifier l’effet de l’augmentation de la longueur d’onde, nous avons réalisé une simulation PIC avec les paramètres laser utilisés aux figures 7.8(e)–(h) en augmentant la longueur d’onde à  $\lambda'_0 = 1.5 \mu\text{m}$ . Pour réaliser cette simulation, toutes les grandeurs spatiales et temporelles dans le code PIC ont été ajustées par un facteur  $\lambda'_0/\lambda_0$  en gardant le nombre de cellules de la grille et le nombre de marqueurs constants. Les résultats sont illustrés à la figure 7.14 pour une cible de densité  $n_0 = 2 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ .

On observe d’abord qu’à  $\lambda'_0 = 1.5 \mu\text{m}$ , il est encore possible d’obtenir une impulsion d’électrons

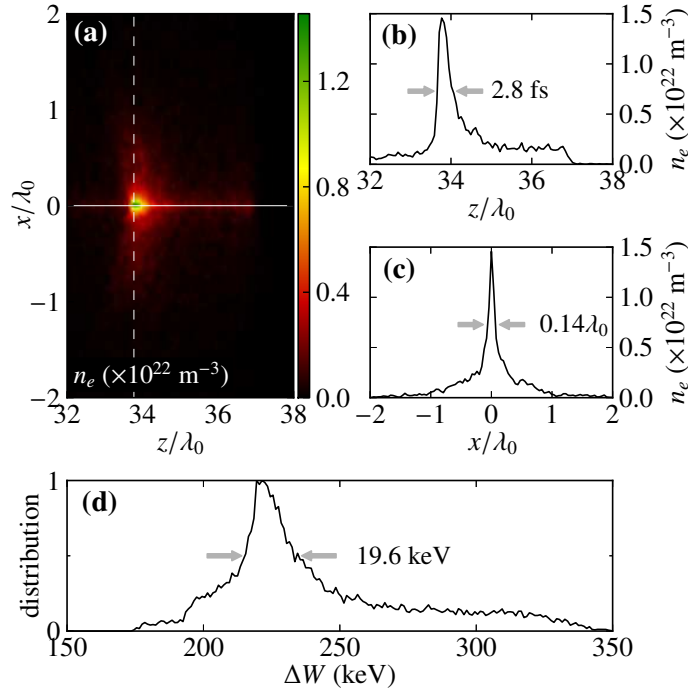


Figure 7.14 – Impulsion d’électrons produite par l’interaction d’une impulsion  $TM_{01}$  caractérisée par  $\lambda_0 = 1.5 \mu\text{m}$ ,  $P = 300 \text{ GW}$ ,  $k_0 a = 20$ ,  $s = 70$  et  $\phi_0 = 22\pi/20$  avec une cible de densité  $n_0 = 2 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . (a) Densité d’électrons dans le plan  $(x, z)$ . La ligne continue et la ligne pointillée indiquent respectivement la position des coupes en  $z$  et en  $x$  illustrées en (b) et (c). (d) Distribution du gain en énergie des électrons. Les données sont prises à  $t - t_0 = 225 \text{ fs}$ . Autrement, l’analyse des données est réalisée de la même manière qu’à la figure 7.3.

ultrabrève bien isolée. En utilisant la même procédure qu’à la figure 7.10 pour calculer la charge, on obtient une valeur de 4.9 fC. Par rapport à la valeur de 0.9 fC obtenue à même densité avec  $\lambda_0 = 800 \text{ nm}$ , cela correspond à une augmentation d’un facteur  $(\lambda'_0/\lambda_0)^{2.7}$ . Au niveau de la durée d’impulsion, on note une augmentation d’un facteur de l’ordre de 3, ce qui est supérieur au ratio  $\lambda'_0/\lambda_0$ . Ceci est vraisemblablement dû à l’élargissement observé au niveau de la distribution en énergie ; la pleine largeur à mi-hauteur a triplé par rapport aux résultats obtenus à  $\lambda_0 = 800 \text{ nm}$ . On voit également que le pic de la distribution en énergie s’est significativement déplacé par rapport aux résultats rapportés la figure 7.10. La cause de ces différences importantes par rapport au cas à  $\lambda_0 = 800 \text{ nm}$  se situe très probablement au niveau de la dynamique d’ionisation. Nous avons pu valider cette hypothèse en répétant la simulation à une densité beaucoup plus faible où les effets de charge d’espace sont négligeables.

En somme, ces résultats préliminaires montrent qu’il est possible d’augmenter de manière significative la charge des impulsions d’électrons en augmentant la longueur d’onde de la source laser. Toutefois, cela se fait au détriment de la qualité de l’impulsion : sa distribution en énergie est plus large et sa durée est également plus longue. Une procédure d’optimisation sera ainsi vraisemblablement requise afin de trouver la longueur d’onde optimale en vue d’une application particulière.



# Chapitre 8

## Conclusion

Depuis l'opération du premier prototype fonctionnel en 1960 par Maiman, le laser a été à l'origine d'une multitude d'innovations et de révolutions scientifiques. Le domaine de l'accélération de particules n'est pas étranger à ce phénomène. Au cours des deux dernières décennies, le développement de systèmes laser de haute puissance dans plusieurs laboratoires dans le monde a engendré un intérêt croissant envers l'accélération d'électrons par laser. Les multiples schémas d'accélération qui ont été proposés laissent entrevoir des possibilités excitantes dans le développement d'accélérateurs d'électrons compacts à faible coût. De plus, les faisceaux d'électrons accélérés par laser possèdent des propriétés remarquables qui en font des candidats de choix pour plusieurs applications.

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à la modélisation d'un schéma d'accélération d'électrons basé sur l'utilisation d'impulsions laser de polarisation radiale. Cette méthode tire profit de la forte composante longitudinale du champ électrique qui apparaît au centre d'un faisceau  $TM_{01}$  lorsqu'il est focalisé. À puissance laser suffisamment élevée, un électron situé près du plan focal de l'impulsion laser peut être capturé et accéléré parallèlement à l'axe optique en demeurant en phase avec un demi-cycle optique du champ électrique longitudinal. Spécifiquement, l'objectif général de cet ouvrage était de modéliser la dynamique d'accélération dans le régime des impulsions  $TM_{01}$  ultrabrèves et non paraxiales.

Ce dernier chapitre est divisé en deux volets. La section §8.1 résume les contributions issues des travaux de doctorat présentés dans cette thèse, tandis que la section §8.2 offre quelques pistes de recherche pour les travaux futurs.

### 8.1 Contributions

Les ingrédients théoriques nécessaires à la modélisation de l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  ont été présentés au chapitre 2. Après un bref rappel de quelques notions d'électrodynamique classique relativiste, nous avons obtenu en premier lieu une expression pour le champ électromagnétique de l'impulsion  $TM_{01}$  dans le cadre de l'approximation paraxiale et de l'approximation de

l'enveloppe lente, deux outils fréquemment utilisés dans les travaux précédents sur la modélisation de l'accélération par impulsions  $TM_{01}$ . Toutefois, afin d'analyser l'accélération en régime d'impulsions ultrabrèves et fortement focalisées, il est nécessaire de modéliser l'impulsion  $TM_{01}$  comme une solution exacte aux équations de Maxwell. Pour ce faire, nous avons choisi de présenter une approche simple et systématique développée par Alexandre April dans ses travaux de doctorat. Cette dernière permet d'obtenir une solution exacte sous forme fermée pour le champ électromagnétique de l'impulsion  $TM_{01}$ . Cette solution présente un avantage important du point de vue de la complexité numérique ; avec la méthode d'April, l'utilisation d'une solution exacte ne requiert guère plus de temps de calcul que l'utilisation d'une solution approximative. Mentionnons également que grâce à la méthode des vecteurs de Hertz, nous avons pu présenter la modélisation de l'impulsion  $TM_{01}$  paraxiale ainsi que celle de l'impulsion  $TM_{01}$  exacte dans un cadre de travail cohérent et unifié. Cette contribution originale revêt une importance particulière étant donné qu'elle permet d'assurer un lien entre nos travaux et les travaux précédents basés sur l'approximation paraxiale et l'approximation de l'enveloppe lente.

Au chapitre 3, nous avons décrit les techniques de simulation numérique utilisées dans cet ouvrage pour modéliser l'accélération d'électrons. Une grande partie de ce chapitre a été consacrée à la description de la méthode *particle-in-cell* (PIC). Cette technique de simulation à la fine pointe permet de simuler de manière extrêmement rigoureuse et réaliste l'interaction d'une impulsion laser avec un milieu gazeux de faible densité. Son implémentation dans notre groupe de recherche constitue, à l'avis de l'auteur de ces lignes, une contribution importante. Comme implémentation de la méthode PIC, nous avons choisi d'utiliser le projet libre et collaboratif *Epoch*, auquel nous avons codé et ajouté notre propre module permettant de tenir compte d'une impulsion  $TM_{01}$  ultrabrève et fortement focalisée incidente sur le milieu. Le chapitre 3 peut peut-être paraître un peu lourd pour le lecteur. Toutefois, comme il n'a pas été possible de trouver dans la littérature une documentation claire et satisfaisante du fonctionnement interne d'un code PIC et comme il s'agit de la première fois que cette méthode est implémentée dans notre groupe de recherche, nous avons choisi d'en effectuer une description détaillée dans un souci de pérennité.

Le chapitre 4 est articulé autour d'une publication qui s'intéresse à l'accélération d'un électron initialement au repos sur l'axe optique. Ce cas particulier, pour lequel la dynamique se réduit à une dimension spatiale, permet de bien mettre en évidence les propriétés du schéma d'accélération. Dans cette publication, nous avons présenté pour la première fois à la communauté scientifique l'utilisation de la méthode d'April comme outil pour l'exploration de la dynamique dans des conditions de forte focalisation et d'impulsions ultrabrèves. Cette contribution représente, au meilleur de notre connaissance, la première étude systématique de l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  dans ce régime de conditions extrêmes. Les résultats obtenus dans ce chapitre nous ont permis de mettre en évidence deux propriétés intéressantes des impulsions  $TM_{01}$  ultrabrèves et non paraxiales pour l'accélération d'électrons. Premièrement, à haute puissance, la réduction de la durée de l'impulsion laser permet d'augmenter significativement l'efficacité du processus d'accélération. Deuxièmement, la réduction de la taille du faisceau permet d'atteindre le seuil d'accélération à des puissances laser beaucoup

moins élevées. À la lumière de ces résultats, il apparaît que l'accélération d'électrons par impulsions laser de polarisation radiale est beaucoup plus accessible en laboratoire que ce que prédisaient jusqu'à maintenant les études basées sur une théorie paraxiale.

Bien qu'une solution exacte pour l'impulsion  $TM_{01}$  permet l'analyse de la dynamique en régime non paraxial, il est généralement accepté dans la littérature scientifique que l'approximation paraxiale est adéquate pour la modélisation de l'accélération dans des conditions de focalisation modérée ( $k_0 z_R \gtrsim 125$ ). Le chapitre 5 est constitué d'une publication qui vise à montrer que ce n'est pas le cas. En comparant des résultats obtenus avec la solution exacte de l'impulsion  $TM_{01}$  et sa contrepartie paraxiale pour l'accélération d'un nuage d'électrons dans des conditions de faible focalisation ( $k_0 z_R = 500$ ), nous avons mis en évidence l'existence de différences très importantes. Grâce à une analyse perturbative effectuée à partir de la solution exacte, nous avons montré que l'échec de l'approximation paraxiale en régime ultrarelativiste provient d'une symétrie artificielle qui est introduite au niveau des composantes transverses du champ électromagnétique au premier ordre. À haute puissance, la dynamique de l'électron dans le plan transverse est dominée par l'effet des premières corrections non paraxiales aux composantes du champ. La contribution principale de l'article inséré au chapitre 5 est d'envoyer à la communauté scientifique une recommandation importante : pour modéliser correctement l'accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$ , il est avisé d'utiliser des solutions aussi précises que possible, idéalement exactes.

Une des propriétés intéressantes d'un schéma accélération d'électrons par impulsions  $TM_{01}$  est la forte compression longitudinale induite lors de l'accélération sous-cycle par le champ électrique longitudinal. Ceci favorise la production d'impulsions d'électrons extrêmement courtes qui pourraient s'avérer très utiles dans le cadre d'expériences d'imagerie atomique et moléculaire. Dans le passé, certains travaux de modélisation ont prédit la possibilité, à l'aide d'impulsions  $TM_{01}$  et de cibles nanométriques, de produire des impulsions d'électrons attosecondes à des énergies relativistes de 20 MeV et plus. À ces énergies, les électrons accélérés s'avèrent toutefois de peu d'intérêt pour les expériences de diffraction électronique ultrarapide, qui opèrent généralement à des énergies inférieures au MeV.

Dans la publication insérée au chapitre 6, nous avons démontré la possibilité de générer des impulsions d'électrons ultrabrèves et quasi-monoénergétiques à une énergie de 240 keV lorsqu'une impulsion  $TM_{01}$  de quelques cycles est fortement focalisée dans un gaz de faible densité. La durée initiale de ces impulsions d'électrons est de l'ordre de la femtoseconde. Les résultats présentés dans ce chapitre sont appuyés par la réalisation de simulations PIC en trois dimensions avec des paramètres laser à la portée de la technologie actuelle. Dans l'état actuel des choses, la technologie d'accélérateur de utilisée dans les expériences de diffraction électronique ultrarapide permet, au mieux, de produire des impulsions d'électrons dont la durée initiale est de l'ordre de 70 fs. Notre contribution ouvre ainsi une avenue intéressante vers une amélioration significative de la résolution temporelle dans ces expériences. Notons finalement que les paramètres laser utilisés dans cette étude correspondent au régime des impulsions ultrabrèves et non paraxiales, pour lesquelles une description exacte du champ électromagnétique est requise. Cela renforce une fois de plus l'intérêt que présente ce régime pour

l'accélération d'électrons.

Le chapitre 7 s'insère dans cette thèse comme la suite logique des travaux présentés au chapitre 6. La publication qui en constitue le noyau a pour but principal de compléter l'étude de la production d'impulsions d'électrons ultrabrèves dans le régime énergétique compatible avec les expériences de diffraction électronique ultrarapide. Dans un premier temps, nous avons effectué une étude des différents paramètres des impulsions laser (puissance, durée, focalisation et phase) sur les propriétés des impulsions d'électrons produites. D'un point de vue expérimental, la technique d'accélération proposée étant tout-optique, elle présente l'avantage que les propriétés des impulsions d'électrons peuvent être contrôlées en ajustant les paramètres de la source laser, tout en gardant la cible conventionnelle et techniquement simple. Parmi les résultats obtenus, un des plus intéressants est la possibilité de synchroniser l'énergie des impulsions d'électrons sur l'intervalle de 100 à 300 keV, qui est généralement préconisé pour la diffraction électronique. En marge de l'étude paramétrique, nous avons effectué dans un second temps une analyse des propriétés des impulsions d'électrons dans la perspective d'une application dans des expériences de diffraction électronique ultrarapide. Il apparaît qu'avec les systèmes laser actuels et les optiques électroniques couramment utilisées dans le domaine, les impulsions d'électrons produites auraient les caractéristiques requises pour la diffraction électronique ultrarapide.

D'un point de vue global, cette thèse a permis d'unifier et de donner une suite aux travaux pionniers de Charles Varin et d'Alexandre April dans le cadre de l'axe de recherche piloté par le Prof. Michel Piché sur l'accélération d'électrons par impulsions laser de polarisation radiale. Aux yeux de l'auteur de ces lignes, ce travail d'unification et de continuité représente une contribution et une source de fierté importantes.

## 8.2 Perspectives

Les articles insérés dans cette thèse font mention de quelques pistes pour la suite de nos travaux. Dans cette section, nous revenons sur certains de ces éléments et présentons également quelques nouvelles perspectives.

Dans la seconde moitié de ce projet de doctorat, le domaine de la diffraction électronique ultrarapide s'est imposé comme une application éventuelle intéressante de notre schéma d'accélération. En effet, la démonstration de la possibilité de générer des impulsions d'électrons femtosecondes dans la fenêtre énergétique de 100 à 300 keV laisse entrevoir que notre schéma d'accélération pourrait potentiellement remplacer avantageusement les sources d'électrons dc utilisées dans les expériences actuelles. Bien que les travaux présentés dans cet ouvrage constituent une première étape dans cette direction, plusieurs points restent encore à éclaircir. Tel que mentionné au chapitre précédent, les impulsions d'électrons produites par notre méthode devront très probablement, une fois générées, être manipulées par des optiques électroniques avant d'atteindre l'échantillon. La modélisation de l'effet de ces dispositifs, qui implique de propager les électrons sur une distance de l'ordre de plusieurs millimètres, est hors de la portée des codes PIC. Des logiciels de modélisation de lignes de transport de faisceaux

de particules, tel que GPT<sup>1</sup>, peuvent toutefois s'acquitter très bien de ce travail [172]. Finalement, bien que la technologie laser nécessaire existe actuellement, il ne fait aucun doute que la réalisation d'un montage de diffraction électronique ultrarapide en laboratoire constitue un grand défi. À elle seule, la mesure de la durée d'impulsions d'électrons aussi courtes constitue un effort de recherche important [81].

Une autre perspective intéressante est la réalisation de simulations PIC avec Epoch pour investiguer la dynamique d'accélération dans un régime de puissance laser plus élevée, plus spécifiquement entre 10 et 100 TW. En effet, de plus en plus de systèmes laser sont aujourd'hui capable d'atteindre ces puissances crêtes. Il serait entre autres intéressant de regarder s'il est possible de produire des impulsions d'électrons ultrabrèves et isolées à partir d'un milieu gazeux diffus, comme c'est le cas aux puissances plus modérées. Des impulsions d'électrons ultrabrèves et relativistes pourraient s'avérer intéressantes pour l'injection dans un dispositif d'accélération secondaire, comme un accélérateur diélectrique [127] ou un accélérateur plasma [74, 113]. Les propriétés requises pour ces applications sont, pour la première, une durée attoseconde et un profil transverse nanométrique, et, pour la seconde, une durée femtoseconde et une charge supérieure à 1 pC. Ces avenues de recherche sont présentement sous investigation par mon collègue Charles Varin à l'Université d'Ottawa.

Sur un plan plus conceptuel, l'étude de différentes variations de notre schéma d'accélération pourraient s'avérer intéressantes. Un premier exemple est l'utilisation d'impulsions  $TM_{01}$  présentant un glissement en fréquence (*frequency chirp*). Des travaux récents ont en effet suggéré que la présence d'un glissement en fréquence pourrait s'avérer avantageuse pour l'accélération de particules (voir par exemple [53, 91, 140]). Toutefois, il n'est pas clair que la théorie derrière la modélisation des impulsions laser utilisées dans ces travaux n'entraîne pas l'apparition d'une composante de fréquence nulle dans leur spectre, une propriété qui est non physique [96]. Avec la méthode développée par Alexandre April, il s'avère qu'une impulsion glissée en fréquence peut être modélisée de manière exacte en choisissant un paramètre  $s$  complexe dans l'expression du spectre de Poisson. L'effet de cette modification sur la dynamique d'accélération est présentement sous investigation par mon collègue Pascal Hogan-Lamarre. Une seconde variation intéressante du schéma d'accélération est l'utilisation d'aiguilles de lumière pour accélérer des électrons. Les aiguilles de lumière sont des faisceaux présentant une tache focale axiale étendue et un patron de polarisation presque purement longitudinal [37]. Il est souvent mentionné que le problème principal associé à cette approche réside dans la faisabilité de générer des aiguilles de lumière de haute puissance. Une solution à ce défi pourrait toutefois être apportée par les travaux récents et astucieux de mes collègues Denis Panneton et Guillaume St-Onge [124].

---

1. General Particle Tracer, <http://www.pulsar.nsl/gpt/>



# Bibliographie

- [1] M. Aidelsburger, F. O. Kirchner, F. Krausz et P. Baum, *Single-electron pulses for ultrafast diffraction*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 107 (2010), p. 19714–19719.
- [2] M. V. Ammosov, N. B. Delone et V. P. Krainov, *Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field*, Sov. Phys. JETP, 23 (1986), p. 1191.
- [3] A. Anderson, F. Lücking, T. Prikoszovits, M. Hofer, Z. Cheng, C. C. Neacsu, M. Scharrer, S. Rammler, P. S. J. Russell, G. Tempea et A. Assion, *Multi-mJ carrier envelope phase stabilized few-cycle pulses generated by a tabletop laser system*, Appl. Phys. B, 103 (2011), p. 531–536.
- [4] A. April, *Nonparaxial elegant Laguerre-Gaussian beams*, Opt. Lett., 33 (2008), p. 1392–1394.
- [5] A. April, *Nonparaxial TM and TE beams in free space*, Opt. Lett., 33 (2008), p. 1563–1565.
- [6] A. April, *Power carried by a nonparaxial TM beam*, J. Opt. Soc. Am. A, 27 (2010), p. 76–81.
- [7] A. April, *Ultrashort, strongly focused laser pulses in free space*, in Coherence and Ultrashort Pulse Laser Emission, F. J. Duarte, éd., InTech, 2010, p. 355–382.
- [8] A. April, *Impulsions laser ultrabrèves et fortement focalisées dans le vide*, Thèse de doctorat, Université Laval, 2012.
- [9] A. April et M. Piché,  *$4\pi$  Focusing of  $TM_{01}$  beams under nonparaxial conditions*, Opt. Express, 18 (2010), p. 22128–22140.
- [10] G. B. Arfken et H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, 5<sup>th</sup> éd., 2001.
- [11] S. Banerjee, S. Y. Kalmykov, N. D. Powers, G. Golovin, V. Ramanathan, N. J. Cunningham, K. J. Brown, S. Chen, I. Ghebregziabher, B. A. Shadwick, D. P. Umstadter, B. M. Cowan, D. L. Bruhwiler, A. Beck et E. Lefebvre, *Stable, tunable, quasimonoeenergetic electron beams produced in a laser wakefield near the threshold for self-injection*, Phys. Rev. ST – Accel. Beams, 16 (2013), p. 031302.
- [12] S. Banerjee, N. D. Powers, V. Ramanathan, I. Ghebregziabher, K. J. Brown, C. M. Maharjan, S. Chen, A. Beck, E. Lefebvre, S. Y. Kalmykov, B. A. Shadwick et D. P. Umstadter, *Gene-*

*ration of tunable, 100–800 MeV quasi-monoenergetic electron beams from a laser-wakefield accelerator in the blowout regime*, Phys. Plasmas, 19 (2012), p. 056703.

- [13] D. Bauer et P. Mulser, *Exact field ionization rates in the barrier-suppression regime from numerical time-dependent Schrödinger-equation calculations*, Phys. Rev. A, 59 (1998), p. 569–577.
- [14] P. Baum, *On the physics of ultrashort single-electron pulses for time-resolved microscopy and diffraction*, Chem. Phys., 423 (2009), p. 55–61.
- [15] P. Baum, D.-S. Yang et A. H. Zewail, *4D visualization of transitional structures in phase transformations by electron diffraction*, Science, 318 (2007), p. 788–792.
- [16] P. Baum et A. H. Zewail, *Attosecond electron pulses for 4D diffraction and microscopy*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 104 (2007), p. 18409–18414.
- [17] B. Beaurepaire, A. Lifschitz et J. Faure, *Electron acceleration in sub-relativistic wakefields driven by few-cycle laser pulses*, New J. Phys., 16 (2014), p. 023023.
- [18] P. M. Bellan, *Fundamentals of Plasma Physics*, Cambridge University Press, 2006.
- [19] K. Benneth, *EPOCH : Developers manual for the EPOCH PIC codes (version 3.1)*, University of Warwick, 2011.
- [20] C. K. Birdsall et A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, Adam Hilger, 1991.
- [21] S. G. Bochkarev, K. I. Popov et V. Y. Bychenkov, *Vacuum electron acceleration by a tightly focused, radially polarized, relativistically strong laser pulse*, Plasma Phys. Rep., 37 (2011), p. 603–614.
- [22] E. J. Bochove, G. T. Moore et M. O. Scully, *Acceleration of particles by an asymmetric Hermite-Gaussian laser beam*, Phys. Rev. A, 46 (1992), p. 6640–6653.
- [23] J. P. Boris, *Relativistic plasma simulation – optimization of a hybrid code*, in Proceedings of the Fourth Conference on Numerical Simulation of Plasmas, J. P. Boris et R. A. Shanny, édés., Naval Research Laboratory, Washington, D.C., 1970.
- [24] M. Born et E. Wolf, *Principles of Optics*, Cambridge University Press, 7th éd., 1999.
- [25] T. Brabec et F. Krausz, *Intense few-cycle laser fields : Frontiers of nonlinear optics*, Rev. Mod. Phys., 72 (2000), p. 545–591.
- [26] C. S. Brady et T. D. Arber, *An ion acceleration mechanism in laser illuminated targets with internal electron density structure*, Plasma Phys. Control. Fusion, 53 (2011), p. 015001.
- [27] J. Breuer et P. Hommelhoff, *Laser-based acceleration of nonrelativistic electrons at a dielectric structure*, Phys. Rev. Lett., 111 (2013), p. 134803.
- [28] S. V. Bulanov, T. Z. Esirkepov, J. Koga et T. Tajima, *Interaction of electromagnetic waves with plasma in the radiation-dominated regime*, Plasma Phys. Rep., 30 (2004), p. 196–213.



- [29] S. Carbajo, L. J. Wong, E. Nanni, D. N. Schimpf et F. X. Kärtner, *Ultra-intense few-cycle radial polarization source for vacuum laser acceleration*, in *Research in Optical Sciences*, Optical Society of America, 2014, p. HTu2C.6.
- [30] T. A. Carlson, C. Nestor, N. Wasserman et J. D. McDowell, *Calculated ionization potentials for multiply charged ions*, *At. Data. Nucl. Data Tables*, 2 (1970), p. 63–99.
- [31] C. F. R. Caron et R. M. Potvliege, *Free-space propagation of ultrashort pulses : space-time couplings in Gaussian pulse beams*, *J. Mod. Opt.*, 46 (1999), p. 1881–1891.
- [32] R. G. Carter, *Acceleration technologies for charged particles : an introduction*, *Contemp. Phys.*, 52 (2011), p. 15–41.
- [33] X. Chen, A. Malvache, A. Ricci, A. Jullien et R. Lopez-Martens, *Efficient hollow fiber compression scheme for generating multi-mJ, carrier-envelope phase stable, sub-5 fs pulses*, *Laser Phys.*, 21 (2011), p. 198–201.
- [34] C. E. Clayton, K. A. Marsh, A. Dyson, M. Everett, A. Lal, W. P. Leemans, R. Williams et C. Joshi, *Ultrahigh-gradient acceleration of injected electrons by laser-excited relativistic electron plasma waves*, *Phys. Rev. Lett.*, 70 (1993), p. 37–40.
- [35] L. Dai, J.-X. Li, W.-P. Zang et J.-G. Tian, *Vacuum electron acceleration driven by a tightly focused radially polarized Gaussian beam*, *Opt. Express*, 19 (2011), p. 9303–9308.
- [36] C. Davisson et L. H. Germer, *Diffraction of electrons by a crystal of nickel*, *Phys. Rev.*, 30 (1927), p. 705–741.
- [37] H. Dehez, A. April et M. Piché, *Needles of longitudinally polarized light : guidelines for minimum spot size and tunable axial extent*, *Opt. Express*, 20 (2012), p. 14891–14905.
- [38] N. B. Delone et V. P. Krainov, *Multiphoton Processes in Atoms*, Springer, Berlin, 2000.
- [39] G. A. Deschamps, *Gaussian beam as a bundle of complex rays*, *Electron. Lett.*, 7 (1971), p. 684–685.
- [40] R. Dorn, S. Quabis et G. Leuchs, *Sharper focus for a radially polarized light beam*, *Phys. Rev. Lett.*, 91 (2003), p. 233901.
- [41] J. R. Dwyer, C. T. Hebeisen, R. Ernstorfer, M. Harb, V. B. Deyirmenjian, R. E. Jordan et R. J. D. Miller, *Femtosecond electron diffraction : Making the molecular movie*, *Phil. Trans. R. Soc. A*, 364 (2006), p. 741–778.
- [42] J. H. Eberly et A. Sleeper, *Trajectory and mass shift of a classical electron in a radiation pulse*, *Phys. Rev.*, 176 (1968), p. 1570–1573.
- [43] E. Esarey, C. B. Schroeder et W. P. Leemans, *Physics of laser-driven plasma-based electron accelerators*, *Rev. Mod. Phys.*, 81 (2009), p. 1229–1285.

- [44] E. Esarey, P. Sprangle et J. Krall, *Laser acceleration of electrons in vacuum*, Phys. Rev. E, 52 (1995), p. 5443–5453.
- [45] J. Faure, Y. Glinec, A. Pukhov, S. Kiselev, S. Gordienko, E. Lefebvre, J.-P. Rousseau, F. Burgy et V. Malka, *A laser-plasma accelerator producing monoenergetic electron beams*, Nature, 431 (2004), p. 541–544.
- [46] J. R. Fontana et R. H. Pantell, *A high-energy laser accelerator for electrons using the inverse Cherenkov effect*, J. Appl. Phys., 54 (1983), p. 4285–4288.
- [47] P.-L. Fortin, *Dynamique d'un nuage d'électrons soumis à un faisceau  $TM_{01}$  ultra-intense et ultrabref : Étude sur les conditions initiales*, Mémoire de maîtrise, Université Laval, 2008.
- [48] P.-L. Fortin, M. Piché et C. Varin, *Direct-field electron acceleration with ultrafast radially polarized laser beams : scaling laws and optimization*, J. Phys. B, 43 (2010), p. 025401.
- [49] M. Fuchs, R. Weingartner, A. Popp, Z. Major, S. Becker, J. Osterhoff, I. Cortrie, B. Zeitler, R. Horlein, G. D. Tsakiris, U. Schramm, T. P. Rowlands-Rees, S. M. Hooker, D. Habs, F. Krausz, S. Karsch et F. Grüner, *Laser-driven soft-X-ray undulator source*, Nature Phys., 5 (2009), p. 826–829.
- [50] T. Fuchs, H. Szymanowski, U. Oelfke, Y. Glinec, C. Rechatin, J. Faure et V. Malka, *Treatment planning for laser-accelerated very-high energy electrons*, Phys. Med. Biol., 54 (2009), p. 3315–3328.
- [51] C. Gahn, G. D. Tsakiris, A. Pukhov, J. M. ter Vehn, G. Pretzler, P. Thirolf, D. Habs et K. J. Witte, *Multi-MeV electron beam generation by direct laser acceleration in high-density plasma channels*, Phys. Rev. Lett., 83 (1999), p. 4772–4775.
- [52] M. Galassi, J. Davies, J. Theiler, B. Gough, G. Jungman, P. Alken, M. Booth et F. Rossi, *GNU Scientific Library Reference Manual*, 3rd éd., 2010.
- [53] B. J. Galow, Y. I. Salamin, T. V. Liseykina, Z. Harman et C. H. Keitel, *Dense monoenergetic proton beams from chirped laser-plasma interaction*, Phys. Rev. Lett., 107 (2011), p. 185002.
- [54] M. Gao, Y. Jiang, G. H. Kassier et R. J. D. Miller, *Single shot time stamping of ultrabright radio frequency compressed electron pulses*, Appl. Phys. Lett., 103 (2013), p. 033503.
- [55] M. Gao, C. Lu, H. Jean-Ruel, L. C. Liu, A. Marx, K. Onda, S.-Y. Koshihara, Y. Nakano, X. Shao, T. Hiramatsu, G. Saito, H. Yamochi, R. R. Cooney, G. Moriena, G. Sciaini et R. J. D. Miller, *Mapping molecular motions leading to charge delocalization with ultrabright electrons*, Nature, 496 (2013), p. 343–346.
- [56] C. G. R. Geddes, C. Toth, J. van Tilborg, E. Esarey, C. B. Schroeder, D. Bruhwiler, C. Nieter, J. Cary et W. P. Leemans, *High-quality electron beams from a laser wakefield accelerator using plasma-channel guiding*, Nature, 431 (2004), p. 538–541.
- [57] P. Gibbon, *Short Pulse Laser Interactions with Matter*, Imperial College Press, 2005.

- [58] P. Goodman, *Fifty Years of Electron Diffraction*, Springer, Berlin, 1981.
- [59] T. Grosjean et D. Courjon, *Smallest focal spots*, Opt. Commun., 272 (2007), p. 314–319.
- [60] C. Guo, G. Rodriguez, A. Lobad et A. J. Taylor, *Structural phase transition of aluminum induced by electronic excitation*, Phys. Rev. Lett., 84 (2000), p. 4493–4496.
- [61] Y. Hadad, L. Labun, J. Rafelski, N. Elkina, C. Klier et H. Ruhl, *Effects of radiation reaction in relativistic laser acceleration*, Phys. Rev. D, 82 (2010), p. 096012.
- [62] S. Hädrich, A. Klenke, A. Hoffmann, T. Eidam, T. Gottschall, J. Rothhardt, J. Limpert et A. Tünnermann, *Nonlinear compression to sub-30-fs, 0.5 mJ pulses at 135 W of average power*, Opt. Lett., 38 (2013), p. 3866–3869.
- [63] J.-H. Han, *Production of a sub-10 fs electron beam with  $10^7$  electrons*, Phys. Rev. ST – Accel. Beams, 14 (2011), p. 050101.
- [64] M. Harb, R. Ernstorfer, C. T. Hebeisen, G. Sciaini, W. Peng, T. Dartigalongue, M. A. Eriksson, M. G. Lagally, S. G. Kruglik et R. J. D. Miller, *Electronically driven structure changes of Si captured by femtosecond electron diffraction*, Phys. Rev. Lett., 100 (2008), p. 155504.
- [65] F. V. Hartemann, *High-Field Electrodynamics*, CRC Press, 2001.
- [66] F. V. Hartemann, S. N. Fochs, G. P. LeSage, N. C. Luhmann Jr., J. G. Woodworth, M. D. Perry, Y. J. Chen et A. K. Kerman, *Nonlinear ponderomotive scattering of relativistic electrons by an intense laser field at focus*, Phys. Rev. E, 51 (1995), p. 4833–4843.
- [67] F. V. Hartemann, J. R. Van Meter, A. L. Troha, E. C. Landahl, N. C. Luhmann, H. A. Baldis, A. Gupta et A. K. Kerman, *Three-dimensional relativistic electron scattering in an ultrahigh-intensity laser focus*, Phys. Rev. E, 58 (1998), p. 5001–5012.
- [68] Z.-H. He, B. Hou, J. A. Nees, J. H. Easter, J. Faure, K. Krushelnick et A. G. R. Thomas, *High repetition-rate wakefield electron source generated by few-millijoule, 30 fs laser pulses on a density downramp*, N. J. Phys., 15 (2013), p. 053016.
- [69] Z.-H. He, A. G. R. Thomas, B. Beaurepaire, J. A. Nees, B. Hou, V. Malka, K. Krushelnick et J. Faure, *Electron diffraction using ultrafast electron bunches from a laser-wakefield accelerator at kHz repetition rate*, Appl. Phys. Lett., 102 (2013), p. 064104.
- [70] R. W. Hellwarth et P. Nouchi, *Focused one-cycle electromagnetic pulses*, Phys. Rev. E, 54 (1996), p. 889–896.
- [71] S. M. Hooker, *Developments in laser-driven plasma accelerators*, Nature Photon., 7 (2013), p. 775–782.
- [72] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons, 3rd éd., 1999.
- [73] C. Joshi et T. Katsouleas, *Plasma accelerators and the energy frontier and on tabletops*, Phys. Today, 56 (2003), p. 47–53.

- [74] S. Y. Kalmykov, L. M. Gorbunov, P. Mora et G. Shvets, *Injection, trapping, and acceleration of electrons in a three-dimensional nonlinear laser wakefield*, Phys. Plasmas, 13 (2006), p. 113102.
- [75] A. Karmakar et A. Pukhov, *Collimated attosecond GeV electron bunches from ionization of high-Z material by radially polarized ultra-relativistic laser pulses*, Laser Part. Beams, 25 (2007), p. 371–377.
- [76] H. Kawauchi, Y. Kozawa et S. Sato, *Generation of radially polarized Ti :sapphire laser beam using a c-cut crystal*, Opt. Lett., 33 (2008), p. 1984–1986.
- [77] L. V. Keldysh, *Ionization in field of a strong electromagnetic wave*, Sov. Phys. JETP, 20 (1965), p. 1307.
- [78] T. W. B. Kibble, *Mutual refraction of electrons and photons*, Phys. Rev., 150 (1966), p. 1060–1069.
- [79] T. W. B. Kibble, *Refraction of electron beams by intense electromagnetic waves*, Phys. Rev. Lett., 16 (1966), p. 1054–1056.
- [80] W. D. Kimura, G. H. Kim, R. D. Romea, L. C. Steinhauer, I. V. Pogorelsky, K. P. Kusche, R. C. Fernow, X. Wang et Y. Liu, *Laser acceleration of relativistic electrons using the inverse Cherenkov effect*, Phys. Rev. Lett., 74 (1995), p. 546–549.
- [81] F. O. Kirchner, A. Gliserin, F. Krausz et P. Baum, *Laser streaking of free electrons at 25 keV*, Nature Photon., 8 (2014), p. 52–57.
- [82] J. Koga, T. Z. Esirkepov et S. V. Bulanov, *Nonlinear Thomson scattering in the strong radiation damping regime*, Phys. Plasmas, 12 (2005), p. 093106.
- [83] Y. Kozawa et S. Sato, *Generation of a radially polarized laser beam by use of a conical Brewster prism*, Opt. Lett., 30 (2005), p. 3063–3065.
- [84] F. Krausz et M. I. Stockman, *Attosecond metrology : from electron capture to future signal processing*, Nature Photon., 8 (2014), p. 205–213.
- [85] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, *The Classical Theory of Fields*, Butterworth-Heinemann, 4th éd., 1980.
- [86] B. T. Landesman et H. H. Barrett, *Gaussian amplitude functions that are exact solutions to the scalar Helmholtz equation*, J. Opt. Soc. Am. A, 5 (1988), p. 1610–1619.
- [87] A. Lawrence-Douglas, *Ionisation Effects for Laser-Plasma Interactions by Particle-in-Cell Code*, Thèse de doctorat, University of Warwick, 2013.
- [88] M. Lax, W. H. Louisell et W. B. McKnight, *From Maxwell to paraxial wave optics*, Phys. Rev. A, 11 (1975), p. 1365–1370.

- [89] G. M. Lerman et U. Levy, *Effect of radial polarization and apodization on spot size under tight focusing conditions*, Opt. Express, 16 (2008), p. 4567–4581.
- [90] F. Y. Li, Z. M. Sheng, Y. Liu, J. Meyer-ter Vehn, W. B. Mori, W. Lu et J. Zhang, *Dense attosecond electron sheets from laser wakefields using an up-ramp density transition*, Phys. Rev. Lett., 110 (2013), p. 135002.
- [91] J.-X. Li, Y. I. Salamin, B. J. Galow et C. H. Keitel, *Acceleration of proton bunches by petawatt chirped radially polarized laser pulses*, Phys. Rev. A, 85 (2012), p. 063832.
- [92] L.-J. Liu, Z.-H. Sheng et J. Zheng, *Electron acceleration by tightly focused radially polarized few-cycle laser pulses*, Chinese Phys. B, 21 (2012), p. 024101.
- [93] O. Lundh, J. Lim, C. Rechatin, L. Ammoura, A. Ben-Ismaïl, X. Davoine, G. Gallot, J.-P. Goddet, E. Lefebvre, V. Malka et J. Faure, *Few femtosecond, few kiloampere electron bunch produced by a laser–plasma accelerator*, Nature Phys., 7 (2011), p. 219–222.
- [94] G. Machavariani, Y. Lumer, I. Moshe, A. Meir et S. Jackel, *Spatially-variable retardation plate for efficient generation of radially- and azimuthally-polarized beams*, Opt. Commun., 281 (2008), p. 732–738.
- [95] G. Machavariani, Y. Lumer, I. Moshe, A. Meir, S. Jackel et D. N., *Birefringence-induced bifocusing for selection of radially or azimuthally polarized laser modes*, Appl. Opt., 46 (2007), p. 3304–3310.
- [96] L. B. Madsen, *Gauge invariance in the interaction between atoms and few-cycle laser pulses*, Phys. Rev. A, 65 (2002), p. 053417.
- [97] H. Malav, K. P. Maheshwari et V. Senecha, *Analytical and numerical investigation of the effect of pulse shape of intense, few-cycles  $TM_{01}$  laser on the acceleration of charged particles*, Indian J. Pure Ap. Phys., 49 (2011), p. 251–256.
- [98] G. Malka, E. Lefebvre et J. L. Miquel, *Experimental observation of electrons accelerated in vacuum to relativistic energies by a high-intensity laser*, Phys. Rev. Lett., 78 (1997), p. 3314–3317.
- [99] V. Malka, J. Faure, Y. A. Gauduel, E. Lefebvre, A. Rousse et K. Y. Phuoc, *Principles and applications of compact laser–plasma accelerators*, Nat. Phys., 4 (2008), p. 447–453.
- [100] V. Malka, J. Faure, Y. Glinec et A. F. Lifschitz, *Laser-plasma accelerator : Status and perspectives*, Phys. Trans. Roy. Soc. A, 364 (2006), p. 601–610.
- [101] V. Malka, S. Fritzler, E. Lefebvre, M.-M. Aleonard, F. Burgy, J.-P. Chambaret, J.-F. Chemin, K. Krushelnick, G. Malka, S. P. D. Mangles, Z. Najmudin, M. Pittman, J.-P. Rousseau, J.-N. Scheurer, B. Walton et A. E. Dangor, *Electron acceleration by a wake field forced by an intense ultrashort laser pulse*, Science, 298 (2002), p. 1596–1600.

- [102] S. P. D. Mangles, C. D. Murphy, Z. Najmudin, A. G. R. Thomas, J. L. Collier, A. E. Dangor, E. J. Divall, P. S. Foster, J. G. Gallacher, C. J. Hooker, D. A. Jaroszynski, A. J. Langley, W. B. Mori, P. A. Norreys, F. S. Tsung, R. Viskup, B. R. Walton et K. Krushelnick, *Monoenergetic beams of relativistic electrons from intense laser-plasma interactions*, *Nature*, 431 (2004), p. 535–538.
- [103] V. Marceau, A. April et M. Piché, *Electron acceleration driven by ultrashort and nonparaxial radially polarized laser pulses*, *Opt. Lett.*, 37 (2012), p. 2442–2444.
- [104] V. Marceau, A. April et M. Piché, *Electron acceleration in vacuum by ultrashort and tightly focused radially polarized laser pulses*, *EPJ Web of Conferences*, 41 (2013), p. 02007.
- [105] V. Marceau, P. Hogan-Lamarre, T. Brabec, M. Piché et C. Varin, *Tunable high-repetition-rate femtosecond few-hundred keV electron source*, *J. Phys. B*, 48 (2015), p. 045601.
- [106] V. Marceau, C. Varin, T. Brabec et M. Piché, *Femtosecond 240-keV electron pulses from direct laser acceleration in a low-density gas*, *Phys. Rev. Lett.*, 111 (2013), p. 224801.
- [107] V. Marceau, C. Varin et M. Piché, *Validity of the paraxial approximation for electron acceleration with radially polarized laser beams*, *Opt. Lett.*, 38 (2013), p. 821–823.
- [108] H. Mark et R. Wierl, *Neuere Ergebnisse der Elektronenbeugung*, *Naturwissenschaften*, 18 (1930), p. 778–786.
- [109] A. Martens, K. Dupraz, K. Cassou, N. Delerue, A. Variola et F. Zomer, *Direct electron acceleration with tightly focused  $TM_{01}$  beams : boundary conditions and nonparaxial corrections*, *Opt. Lett.*, 39 (2014), p. 981–984.
- [110] H. Mashiko, C. M. Nakamura, C. Li, E. Moon, H. Wang, J. Tackett et Z. Chang, *Carrier-envelope phase stabilized 5.6 fs, 1.2 mJ pulses*, *Appl. Phys. Lett.*, 90 (2007), p. 161114.
- [111] K. T. McDonald, *Gaussian laser beams with radial polarization*, March 2000.  
<http://puhep1.princeton.edu/~mcdonald/examples/axicon.pdf>.
- [112] S. C. McEldowney, D. M. Shemo, R. A. Chipman et P. K. Smith, *Creating vortex retarders using photoaligned liquid crystal polymers*, *Opt. Lett.*, 33 (2008), p. 134–136.
- [113] T. Mehrling, J. Grebenyuk, F. S. Tsung, K. Floettmann et J. Osterhoff, *Transverse emittance growth in staged laser-wakefield acceleration*, *Phys. Rev. ST Accel. Beams*, 15 (2012), p. 111303.
- [114] A. M. Michalik et J. E. Sipe, *Analytic model of electron pulse propagation in ultrafast electron diffraction experiments*, *J. Appl. Phys.*, 99 (2006), p. 054908.
- [115] A. M. Michalik et J. E. Sipe, *Theory of ultrafast electron diffraction : The role of electron bunch properties*, *J. Appl. Phys.*, 104 (2008), p. 054905.
- [116] A. M. Michalik et J. E. Sipe, *Evolution of non-Gaussian electron bunches in ultrafast electron diffraction experiments : Comparison to analytic model*, *J. Appl. Phys.*, 105 (2009), p. 084913.

- [117] A. Modena, Z. Najmudin, A. E. Dangor, C. E. Clayton, K. A. Marsh, C. Joshi, V. Malka, C. B. Darrow, C. Danson, D. Neely et F. N. Walsh, *Electron acceleration from the breaking of relativistic plasma waves*, Nature, 377 (1995), p. 606–608.
- [118] P. Mulser, F. Cornolti et D. Bauer, *Modeling field ionization in an energy conserving form and resulting nonstandard fluid dynamics*, Phys. Plasmas, 5 (1998), p. 4466.
- [119] K. Nakajima, *Compact X-ray sources : Towards a table-top free-electron laser*, Nature Phys., 4 (2008), p. 92–93.
- [120] A. V. Nesterov, V. G. Niziev et V. P. Yakunin, *Generation of high-power radially polarized beam*, J. Phys. D, 32 (1999), p. 2871–2875.
- [121] E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems*, Cambridge University Press, 2002.
- [122] R. Palmer, *An introduction to acceleration mechanisms*, in *Frontiers of Particle Beams*, M. Month et S. Turner, édés., vol. 296 de Lecture Notes in Physics, Springer, 1988, p. 607–635.
- [123] J. Pang, Y. K. Ho, X. Q. Yuan, N. Cao, Q. Kong, P. X. Wang, L. Shao, E. H. Esarey et A. M. Sessler, *Subluminal phase velocity of a focused laser beam and vacuum laser acceleration*, Phys. Rev. E, 66 (2002), p. 066501.
- [124] D. Panneton, M. Piché, S. Thibault et G. St-Onge, *Needles of light produced with a spherical mirror*, Opt. Lett., 40 (2015), p. 419–422.
- [125] T. S. Parker et L. O. Chua, *Practical Numerical Algorithms for Chaotic Systems*, Springer, Berlin, 3rd éd., 1989.
- [126] S. Payeur, S. Fourmaux, B. E. Schmidt, J.-P. MacLean, C. Tchervenkov, F. Légaré, M. Piché et J.-C. Kieffer, *Generation of a beam of fast electrons by tightly focusing a radially polarized ultrashort laser pulse*, Appl. Phys. Lett., 101 (2012), p. 041105.
- [127] E. A. Peralta, K. Soong, R. J. England, E. R. Colby, Z. Wu, B. Montazeri, C. McGuinness, J. McNeur, K. J. Leedle, D. Walz, E. B. Sozer, B. Cowan, B. Schwartz, G. Travish et R. L. Byer, *Demonstration of electron acceleration in a laser-driven dielectric microstructure*, Nature, 503 (2013), p. 91–94.
- [128] A. M. Perelomov, V. S. Popov et M. V. Terent'ev, *Ionization of atoms in an alternating electric field*, Sov. Phys. JETP, 23 (1966), p. 924–934.
- [129] D. Pohl, *Operation of a ruby laser in the purely transverse electric mode  $TE_{01}$* , Appl. Phys. Lett., 20 (1972), p. 266–267.
- [130] K. Popov, *Laser based acceleration of charged particles*, Thèse de doctorat, University of Alberta, 2009.
- [131] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling et B. P. Flannery, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, 3rd éd., 2007.

- [132] A. Pukhov et J. M. ter Vehn, *Laser wake field acceleration : the highly non-linear broken-wave regime*, Appl. Phys. B, 64 (2002), p. 355–361.
- [133] B. Quesnel et P. Mora, *Theory and simulation of the interaction of ultraintense laser pulses with electrons in vacuum*, Phys. Rev. E, 58 (1998), p. 3719–3732.
- [134] G. Rodríguez-Morales et S. Chávez-Cerda, *Exact nonparaxial beams of the scalar Helmholtz equation*, Opt. Lett., 29 (2004), p. 430–432.
- [135] F. Rohrlich, *The dynamics of a charged sphere and the electron*, Am. J. Phys., 65 (1997), p. 1051–1056.
- [136] H. Ruhl, *Classical Particle Simulations with the PSC code*, Ruhr-Universität Bochum.
- [137] Y. I. Salamin, *Accurate fields of a radially polarized gaussian laser beam*, New J. Phys., 8 (2006), p. 133.
- [138] Y. I. Salamin, *Electron acceleration from rest in vacuum by an axicon Gaussian laser beam*, Phys. Rev. A, 73 (2006), p. 043402.
- [139] Y. I. Salamin, *Mono-energetic GeV electrons from ionization in a radially polarized laser beam*, Opt. Lett., 32 (2007), p. 90–92.
- [140] Y. I. Salamin, *Net electron energy gain from interaction with a chirped “plane-wave” laser pulse*, Phys. Lett. A, 376 (2012), p. 2442–2445.
- [141] H.-P. Schlenvoigt, K. Haupt, A. Debus, F. Budde, O. Jäckel, S. Pfotenhauer, H. Schwoerer, E. Rohwer, J. G. Gallacher, E. Brunetti, R. P. Shanks, S. M. Wiggins et D. A. Jaroszynski, *A compact synchrotron radiation source driven by a laser-plasma wakefield accelerator*, Nature Phys., 4 (2008), p. 130–133.
- [142] B. E. Schmidt, N. Thiré, M. Boivin, A. Laramée, F. Poitras, G. Lebrun, T. Ozaki, H. Ibrahim et F. Légaré, *Frequency domain optical parametric amplification*, Nature Comm., 5 (2014), p. 3643.
- [143] F. Schwabl, *Statistical Mechanics*, Springer, Berlin, 2nd éd., 2006.
- [144] G. Sciaini, M. Harb, S. G. Kruglik, T. Payer, C. T. Hebeisen, F.-J. M. zu Heringdorf, M. Yamaguchi, M. H. von Hoegen, R. Ernstorfer et R. J. D. Miller, *Electronic acceleration of atomic motions and disordering in bismuth*, Nature, 458 (2009), p. 56–59.
- [145] G. Sciaini et R. J. D. Miller, *Femtosecond electron diffraction : heralding the era of atomically resolved dynamics*, Rep. Prog. Phys., 74 (2011), p. 096101.
- [146] C. J. R. Sheppard, *High-aperture beams : reply to comment*, J. Opt. Soc. Am. A, 24 (2007), p. 1211–1213.
- [147] C. J. R. Sheppard et S. Saghafi, *Transverse-electric and transverse-magnetic beam modes beyond the paraxial approximation*, Opt. Lett., 24 (1999), p. 1543–1545.



- [148] K. Shimoda, *Proposal for an electron accelerator using an optical maser*, Appl. Opt., 1 (1962), p. 33–35.
- [149] A. E. Siegman, *Lasers*, University Science Books, 1986.
- [150] K. P. Singh et M. Kumar, *Electron acceleration by a radially polarized laser pulse during ionization of low density gases*, Phys. Rev. ST – Accel. Beams, 14 (2011), p. 030401.
- [151] B. J. Siwick, J. R. Dwyer, R. E. Jordan et R. J. D. Miller, *Ultrafast electron optics : Propagation dynamics of femtosecond electron packets*, J. Appl. Phys., 92 (2002), p. 1643–1648.
- [152] B. J. Siwick, J. R. Dwyer, R. E. Jordan et R. J. D. Miller, *An atomic-level view of melting using femtosecond electron diffraction*, Science, 302 (2003), p. 1382–1385.
- [153] D. E. Spence, P. N. Kean et W. Sibbett, *60-fsec pulse generation from a self-mode-locked Ti :sapphire laser*, Opt. Lett., 16 (1991), p. 42–44.
- [154] H. Spohn, *The critical manifold of the Lorentz-Dirac equation*, Europhys. Lett., 50 (2000), p. 287–292.
- [155] P. Sprangle, E. Esarey et J. Krall, *Laser driven electron acceleration in vacuum, gases, and plasmas*, Phys. Plasmas, 3 (1996), p. 2183–2190.
- [156] J. Stadler, C. Stanciu, C. Stupperich, et A. J. Meixner, *Tighter focusing with a parabolic mirror*, Opt. Lett., 33 (2008), p. 681–683.
- [157] M. Stalder et M. Schadt, *Linearly polarized light with axial symmetry generated by liquid-crystal polarization converters*, Opt. Lett., 21 (1996), p. 1948–1950.
- [158] D. Strickland et G. Mourou, *Compression of amplified chirped optical pulses*, Opt. Commun., 56 (1985), p. 219–221.
- [159] G. V. Stupakov et M. S. Zolotarev, *Ponderomotive laser acceleration and focusing in vacuum for generation of attosecond electron bunches*, Phys. Rev. Lett., 86 (2001), p. 5274–5277.
- [160] A. Taflove et S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics : The Finite-Difference Time-Domain Method*, Artech House, 3rd éd., 2005.
- [161] T. Tajima et J. M. Dawson, *Laser electron accelerator*, Phys. Rev. Lett., 43 (1979), p. 267–270.
- [162] Y. Takeda et I. Matsui, *Laser linac with grating*, Nucl. Instrum. Methods, 3 (1968), p. 306–310.
- [163] S. Tantawi, M. Shumail, J. Neilson, G. Bowden, C. Chang, E. Hemsing et M. Dunning, *Experimental demonstration of a tunable microwave undulator*, Phys. Rev. Lett., 112 (2014), p. 164802.
- [164] Z. Tao, H. Zhang, P. M. Duxbury, M. Berz et C.-Y. Ruan, *Space charge effects in ultrafast electron diffraction and imaging*, J. Appl. Phys., 111 (2012), p. 044316.
- [165] G. P. Thomson et A. Reid, *Diffraction of cathode rays by a thin film*, Nature, 119 (1927), p. 890.

- [166] S. C. Tidwell, D. H. Ford et W. D. Kimura, *Generating radially polarized beams interferometrically*, Appl. Opt., 29 (1990), p. 2234–2239.
- [167] S. Tokita, M. Hashida, S. Inoue, T. Nishoji, K. Otani et S. Sakabe, *Single-shot femtosecond electron diffraction with laser-accelerated electrons : Experimental demonstration of electron pulse compression*, Phys. Rev. Lett., 105 (2010), p. 215004.
- [168] S. Tokita, S. Inoue, S. Masuno, M. Hashida et S. Sakabe, *Single-shot ultrafast electron diffraction with a laser-accelerated sub-MeV electron pulse*, Appl. Phys. Lett., 95 (2009), p. 111911.
- [169] A. L. Troha et F. V. Hartemann, *Reply to “Comment on ‘Vacuum electron acceleration by coherent dipole radiation’ ”*, Phys. Rev. E, 65 (2002), p. 028502.
- [170] J. Uhlig, C.-G. Wahlströma, M. Walczaka, V. Sundströma et W. Fullagara, *Laser generated 300 keV electron beams from water*, Laser Part. Beams, 29 (2011), p. 415–425.
- [171] Z. Ulanowski et I. K. Ludlow, *Scalar field of nonparaxial Gaussian beams*, Opt. Lett., 25 (2000), p. 1792–1794.
- [172] T. van Oudheusden, E. F. de Jong, S. B. van der Geer, W. P. E. M. O. Root, O. J. Luiten et B. J. Siwick, *Electron source concept for single-shot sub-100 fs electron diffraction in the 100 keV range*, J. Appl. Phys., 102 (2007), p. 093501.
- [173] T. van Oudheusden, P. L. E. M. Pasmans, S. B. van der Geer, M. J. de Loos, M. J. van der Wiel et O. J. Luiten, *Compression of subrelativistic space-charge-dominated electron bunches for single-shot femtosecond electron diffraction*, Phys. Rev. Lett., 105 (2010), p. 264801.
- [174] C. Varin, *Impulsions d’électrons relativistes ultrarapides à l’aide d’un schéma d’accélération par laser dans le vide*, Thèse de doctorat, Université Laval, 2006.
- [175] C. Varin, S. Payeur, V. Marceau, S. Fourmaux, A. April, B. Schmidt, P.-L. Fortin, N. Thiré, T. Brabec, F. Légaré, J.-C. Kieffer et M. Piché, *Direct electron acceleration with radially polarized laser beams*, Appl. Sci., 3 (2013), p. 70–93.
- [176] C. Varin, C. Peltz, T. Brabec et T. Fennel, *Light wave driven electron dynamics in clusters*, Ann. Phys., 526 (2014), p. 135–156.
- [177] C. Varin et M. Piché, *Acceleration of ultra-relativistic electrons using high-intensity  $TM_{01}$  laser beams*, Appl. Phys. B, 74 (2002), p. s83–s88.
- [178] C. Varin et M. Piché, *Relativistic attosecond electron pulses from a free-space laser-acceleration scheme*, Phys. Rev. E, 74 (2006), p. 045602(R).
- [179] C. Varin, M. Piché et M. A. Porrás, *Acceleration of electrons from rest to GeV energies by ultrashort transverse magnetic laser pulses in free space*, Phys. Rev. E, 71 (2005), p. 026603.
- [180] C. Varin, M. Piché et M. A. Porrás, *Analytical calculation of the longitudinal electric field resulting from the tight focusing of an ultrafast transverse-magnetic laser beam*, J. Opt. Soc. Am. A, 23 (2006), p. 2027–2038.

- [181] J. Villasenor et O. Buneman, *Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers*, Comput. Phys. Commun., 69 (1992), p. 306–316.
- [182] J. X. Wang, W. Scheid, M. Hoelss et Y. K. Ho, *Comment on “Vacuum electron acceleration by coherent dipole radiation”*, Phys. Rev. E, 65 (2002), p. 028501.
- [183] P. X. Wang, Y. K. Ho, X. Q. Yuan, Q. Kong, N. Cao, L. Shao, A. M. Sessler, E. Esarey, E. Moshkovich, Y. Nishida, N. Yugami, H. Ito, J. X. Wang et S. Scheid, *Characteristics of laser-driven electron acceleration in vacuum*, J. Appl. Phys., 91 (2002), p. 856–866.
- [184] X. Wang, R. Zgadzaj, N. Fazel, S. A. Yi, X. Zhang, W. Henderson, Y.-Y. Chang, R. Korzekwa, H.-E. Tsai, C.-H. Pai, Z. Li, H. Quevedo, G. Dyer, E. Gaul, M. Martinez, A. Bernstein, T. Borger, M. Spinks, M. Donovan, S. Y. Kalmykov, V. Khudik, G. Shvets, T. Ditmire et M. C. Downer, *Petawatt-laser-driven wakefield acceleration of electrons to 2 GeV in  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  plasma*, AIP Conf. Proc., 1507 (2012), p. 341–344.
- [185] J. D. Watson et F. H. C. Crick, *A structure for deoxyribose nucleic acid*, Nature, 171 (1953), p. 737–738.
- [186] L. J. Wong et F. X. Kärtner, *Direct acceleration of an electron in infinite vacuum by a pulsed radially-polarized laser beam*, Opt. Express, 18 (2010), p. 25035–25051.
- [187] L. J. Wong et F. X. Kärtner, *A threshold for laser-driven linear particle acceleration in unbounded vacuum*, Appl. Phys. Lett., 99 (2011), p. 211101.
- [188] L. J. Wong et F. X. Kärtner, *Two-color-laser-driven direct electron acceleration in infinite vacuum*, Opt. Lett., 36 (2011), p. 957–959.
- [189] L. J. Wong, F. X. Kärtner et S. G. Johnson, *An improved beam waist formula for ultrashort, tightly-focused linearly, radially, and azimuthally polarized laser pulses in free space*, Opt. Lett., 39 (2014), p. 1258–1261.
- [190] V. Yanovsky, V. Chvykov, G. Kalinchenko, P. Rousseau, T. Planchon, T. Matsuoka, A. Maksimchuk, J. Nees, G. Cheriaux, G. Mourou et K. Krushelnick, *Ultra-high intensity 300-TW laser at 0.1 Hz repetition rate*, Opt. Express, 16 (2008), p. 2109–2114.
- [191] K. Yonezawa, Y. Kozawa et S. Sato, *Generation of a radially polarized laser beam by use of the birefringence of a c-cut Nd :YVO<sub>4</sub> crystal*, Opt. Lett., 31 (2006), p. 2151–2153.
- [192] A. H. Zewail, *Femtochemistry : atomic-scale dynamics of the chemical bond*, J. Phys. Chem. A, 104 (2000), p. 5660–5694.
- [193] A. H. Zewail, *4D ultrafast electron diffraction, crystallography, and microscopy*, Annu. Rev. Phys. Chem., 57 (2006), p. 65–103.
- [194] Q. Zhan, *Cylindrical vector beams : from mathematical concepts to applications*, Adv. Opt. Photon., 1 (2009), p. 1–57.