

УДК 538.91

П. А. Головинский^{1,2}, *А. В. Яковец*¹, *В. А. Астапенко*¹¹Московский физико-технический институт (государственный университет)²Воронежский государственный технический университет

Нелинейное возбуждение квантового резонанса Фано

В работе исследовано нелинейное формирование асимметричного профиля Фано в резонансной двухуровневой системе, взаимодействующей с зоной уровней. Представлено динамическое описание резонанса и рассчитана заселенность зоны состояний в зависимости от времени. Обсуждается возможность управления формой заселенности квазиконтинуума за счет изменения интенсивности внешнего поля.

Ключевые слова: квантовый резонанс Фано, двухуровневая система, квазиконтинуум, зона уровней.

P. A. Golovinski^{1,2}, *A. V. Yakovets*¹, *V. A. Astapenko*¹¹Moscow Institute of Physics and Technology (State University)²Voronezh State Technical University

Nonlinear excitation of Fano quantum resonance

The nonlinear formation of the asymmetric Fano profile in a resonant two-level system interacting with the levelband system is investigated. The dynamic description of resonance is presented and the population of the levelband system is calculated as a time function. The possibility to control the shape of the population quasicontinuum by changing the external field intensity is discussed.

Key words: Fano quantum resonance, two-level system, quasicontinuum, levelband system.

1. Введение

Для описания автоионизационных состояний атомов имеется надежная теория, позволившая, в частности, понять динамику ионизации таких состояний аттосекундными импульсами [1–7]. Основными результатами усилий в этом направлении стало понимание внутриатомной составляющей динамики, отвечающей за формирование зависящего от времени дипольного отклика [8,9] и динамики образования электронов в непрерывном спектре [10], убедительно подтвержденные экспериментальными измерениями. При образовании электронов непрерывного спектра важной оказывается конкуренция процессов прямой ионизации и ионизации, идущей через возбуждение дискретного состояния, меняющаяся во времени. Большая часть имеющихся теоретических исследований посвящена изолированным резонансам, но рассмотрено и влияние перекрытия резонансов на их динамику [11]. Отметим, что для квантовых точек возбуждение экситонов находится в видимой области света, где изучение резонансов Фано облегчается наличием развитой экспериментальной техники получения одноцикловых лазерных импульсов [12,13].

Все эти теоретические и экспериментальные усилия объединяет квантовая интерференция, которая проявляется как резонанс в спектре оптического поглощения с характерной асимметричной формой. Близко к основному максимуму возникает глубокий минимум

при энергии, соответствующей деструктивной интерференции амплитуд перехода в дискретное состояние и непрерывный спектр состояний. Важной основой теории Фано является предположение о достаточно высокой плотности состояний, которые можно отнести к непрерывному спектру. Однако в ряде случаев множество близко расположенных уровней оказывается достаточно разреженным. Такая ситуация присутствует в молекулярных спектрах многоатомных молекул, где электронные переходы релаксируют, взаимодействуя с колебательными молекулярными состояниями. Этот случай в отсутствие прямого возбуждения уровней зоны проанализирован в модели Биксона–Джортнера [14]. Настоящая работа посвящена исследованию динамики резонансного возбуждения состояния на фоне зоны эквидистантных уровней лазерным полем в модели Биксона–Джортнера, дополненной с возможностью прямого оптического перехода в зону уровней.

2. Общие уравнения динамики

Рассмотрим квантовую систему, состоящую из основного состояния $|0\rangle$ и возбужденного состояния $|1\rangle$ с энергией E_1 , взаимодействующего с зоной близко расположенных по энергии уровней $|k\rangle$ с энергиями E_k . В данной модели возможно прямое возбуждение лазерным полем дискретного уровня и уровней зоны, как показано на рис. 1.

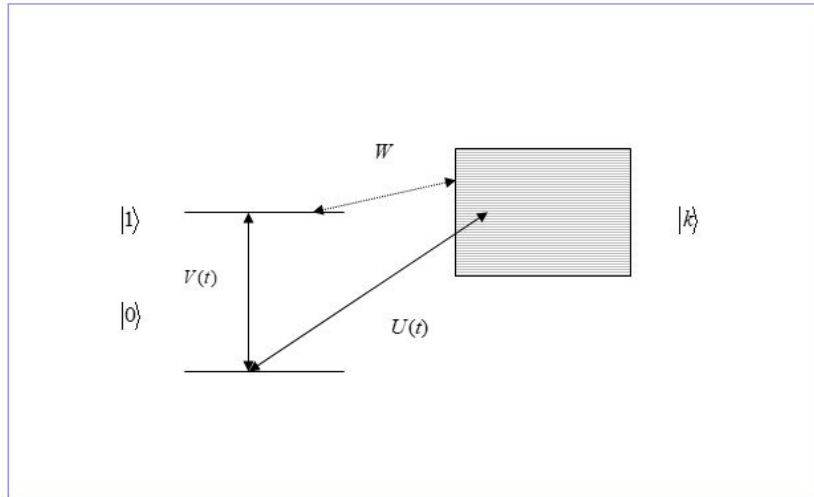


Рис. 1. Схема возбуждения двухуровневой системы, взаимодействующей с зоной уровней

Пусть гамильтониан системы H является суммой гамильтониана H_0 , представляющего независимые состояния, стационарного взаимодействия W возбужденного состояния $|1\rangle$ с уровнями зоны $|k\rangle$ и внешнего зависящего от времени взаимодействия $H_{\text{int}}(t) = V(t) + U(t)$. Взаимодействие $V(t)$ связывает основное состояние $|0\rangle$ и возбужденное состояние $|1\rangle$, $U(t)$ связывает основное состояние $|0\rangle$ и возбужденные состояния зоны $|k\rangle$:

$$H = H_0 + W + V(t) + U(t). \quad (1)$$

Уравнение Шредингера

$$i\dot{\psi} = H\psi \quad (2)$$

в представлении взаимодействия принимает вид

$$\begin{aligned} i\dot{a}_0 &= V_{01}(t)e^{i\omega_{01}t}a_1 + \sum_k U_{0k}(t)e^{i\omega_{0k}t}a_k, \\ i\dot{a}_1 &= V_{10}(t)e^{i\omega_{10}t}a_0 + \sum_k W_{1k}e^{i\omega_{1k}t}a_k, \\ i\dot{a}_k &= U_{k0}e^{i\omega_{k0}t}a_0 + W_{k1}e^{i\omega_{k1}t}a_1. \end{aligned} \quad (3)$$

Аналитическое решение системы уравнений (3) возможно в случае резонанса.

Величины a_0, a_1, a_k являются коэффициентами разложения волновой функции

$$\psi(t) = \sum_{j=0,1} e^{-iE_j} a_j(t) \varphi_j + \sum_n e^{-iE_n} a_n(t) \varphi_n \quad (4)$$

по собственным состояниям φ_k оператора Гамильтона H_0 , удовлетворяющим уравнению

$$H_0 \varphi_k = E_k \varphi_k, \quad (5)$$

и

$$\omega_{kk_1} = E_k - E_{k_1}. \quad (6)$$

Начальные условия для первоначально невозбужденной системы: $a_0(0) = 1, a_1(0) = 0, a_k(0) = 0$. При дополнительных предположениях $W_{k1} = W_{1k} = W, V_{01}(t) = V_{10}(t) = U_1(t), U_{k1} = U_{1k} = U_2(t)$ систему уравнений (3) можно упростить, и мы получим

$$\begin{aligned} i\dot{a}_0 &= U_1(t) e^{i\omega_{01}t} a_1 + U_2(t) \sum_k e^{i\omega_{0k}t} a_k, \\ i\dot{a}_1 &= U_1(t) e^{i\omega_{10}t} a_0 + W \sum_k e^{i\omega_{1k}t} a_k, \\ i\dot{a}_k &= U_2(t) e^{i\omega_{k0}t} a_0 + W e^{i\omega_{k1}t} a_1. \end{aligned} \quad (7)$$

Далее рассматриваем возбуждение системы лазерным полем с мгновенным включением и постоянной фиксированной несущей частотой. Взаимодействие носит квазирезонансный характер, поэтому, удерживая только резонансные слагаемые, в приближении вращающегося поля получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} i\dot{a}_0 &= V_1 e^{-i(\omega_{10}-\omega)t} a_1 + V_2 \sum_k e^{-i(\omega_{k0}-\omega)t} a_k, \\ i\dot{a}_1 &= V_1 e^{i(\omega_{10}-\omega)t} a_0 + W \sum_k e^{i\omega_{1k}t} a_k, \\ i\dot{a}_k &= V_2 e^{i(\omega_{k0}-\omega)t} a_0 + W e^{i\omega_{k1}t} a_1. \end{aligned} \quad (8)$$

Вводя новые амплитуды в соответствии с определениями:

$$\begin{aligned} a_k &= e^{i(\omega_{k0}-\omega)t} A_k, \\ a_1 &= e^{i(\omega_{10}-\omega)t} A_1, \\ a_0 &= A_0, \end{aligned} \quad (9)$$

получим уравнения [15, 16]

$$\begin{aligned} i\dot{A}_0 &= V_1 A_1 + V_2 \sum_k A_k, \\ i\dot{A}_1 &= \Delta_1 A_1 + V_1 A_0 + W \sum_k A_k, \\ i\dot{A}_k &= \Delta_k A_k + V_2 A_0 + W A_1, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\Delta_1 = \omega_{10} - \omega - i\gamma, \Delta_k = \omega_{k0} - \omega - i\gamma_k$, коэффициенты γ, γ_k позволяют феноменологически учесть затухание возбужденных уровней. В области изображений преобразования Лапласа система уравнений (10) принимает вид

$$\begin{aligned} sA_0 &= -iV_1 A_1 - iV_2 \sum_k A_k + 1, \\ sA_1 &= -i\Delta_1 A_1 - iV_1 A_0 - iW \sum_k A_k, \\ sA_k &= -i\Delta_k A_k - iV_2 A_0 - iW A_1. \end{aligned} \quad (11)$$

Из последнего уравнения следует

$$A_k = -i \frac{V_2 A_0 + W A_1}{(s + i\Delta_k)}, \quad (12)$$

и

$$\begin{aligned} sA_0 &= -iV_1 A_1 - (V_2^2 A_0 + V_2 W A_1) \sum_k \frac{1}{(s + i\Delta_k)} + 1, \\ sA_1 &= -i\Delta_1 A_1 - iV_1 A_0 - (V_2 W A_0 + W^2 A_1) \sum_k \frac{1}{(s + i\Delta_k)}. \end{aligned} \quad (13)$$

После вычисления суммы в правой части уравнений (13), приведенного в [17], получим

$$\sum_k \frac{1}{(s + i\Delta_k)} = \frac{\pi}{\omega_0} \coth\left(\frac{\pi s}{\omega_0}\right), \quad (14)$$

где расстояние между эквидистантными уровнями зоны равно ω_0 . Для плотного спектра (квазиконтинуума) $\pi s/\omega_0 \gg 1$ и $\coth(\pi s/\omega_0) \approx 1$, тогда будем иметь

$$\begin{aligned} sA_0 &= -iV_1 A_1 - (V_2^2 A_0 + V_2 W A_1) \frac{\pi}{\omega_0} + 1, \\ sA_1 &= -i\Delta_1 A_1 - iV_1 A_0 - (V_2 W A_0 + W^2 A_1) \frac{\pi}{\omega_0}. \end{aligned} \quad (15)$$

Для удобства дальнейших преобразований введем обозначения:

$$w_0 = \frac{V_2^2 \pi}{\omega_0}, \quad w_c = \frac{\pi V_2 W}{\omega_0}, \quad w = \frac{\pi W^2}{\omega_0}. \quad (16)$$

С учетом этого решение системы уравнений запишем в виде

$$\begin{aligned} A_0(s) &= \frac{s + i\Delta_1 + w}{(s + w_0)(s + i\Delta_1 + w) - (iV_1 + w_c)^2}, \\ A_1(s) &= -\frac{iV_1 + w_c}{(s + w_0)(s + i\Delta_1 + w) - (iV_1 + w_c)^2}, \\ A_k(s) &= i \frac{W(iV_1 + w_c) - V_2(s + i\Delta_1 + w)}{(s + i\Delta_k)[(s + w_0)(s + i\Delta_1 + w) - (iV_1 + w_c)^2]}. \end{aligned} \quad (17)$$

Выражения (17) переходят в решения [16], полученные с помощью преобразования Фурье, при замене $s \rightarrow -i\omega$. С течением времени в непрерывном спектре формируется квазистационарное распределение:

$$A_k(t) = i \frac{V_2(\Delta_1 - \Delta_k - iw) - W(V_1 - iw_c)}{(\Delta_k + iw_0)(\Delta_1 - \Delta_k - iw) + (V_1 - iw_c)^2} \exp(-i\Delta_k t). \quad (18)$$

Выражение (18) имеет два полюса, что приводит к двугорбой форме заселенности уровней, характерной для интерференционного профиля Фано.

3. Квантовый резонанс на фоне дискретного квазиконтинуума

Рассмотрим пример зависимости заселенности уровней зоны от энергии при точном резонансе, когда $\Delta_1 = 0$. На рис. 2 показано конечное распределение заселенности зоны уровней $P_{Fano}(\Delta_k) = |A_k(t)|^2$ при параметрах: $\omega_0 = 0.0011$ эВ, $W = 0.001$ эВ, $V_1 = 0.0022$ эВ, $V_2 = 0.0018$ эВ, $\gamma = \gamma_k = 0$. Отметим, что асимметричная форма распределения нелинейным образом зависит от величины поля и может существенно отличаться по виду при других значениях параметров.

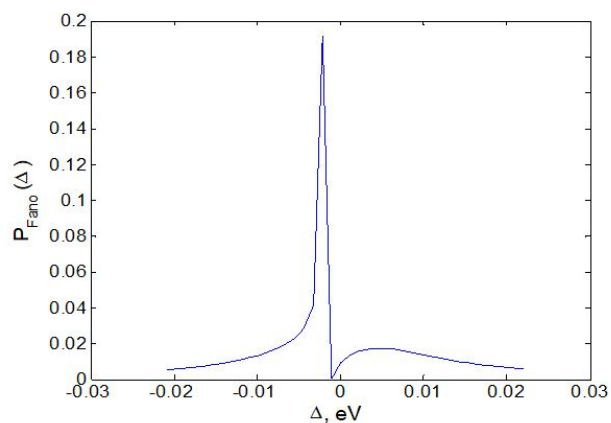


Рис. 2. Финальная заселенность квазиконтинуума в форме Фано

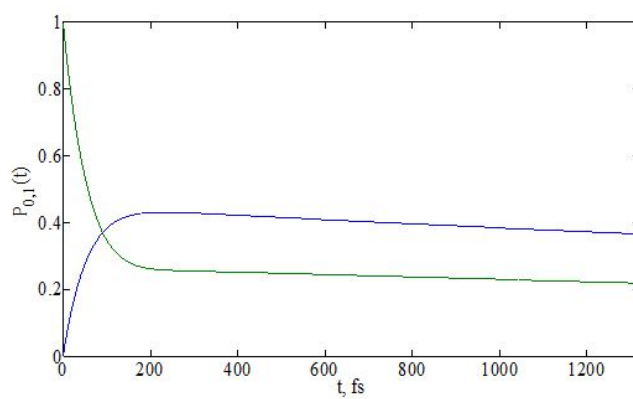


Рис. 3. Динамика заселенности уровней $|0\rangle$ и $|1\rangle$

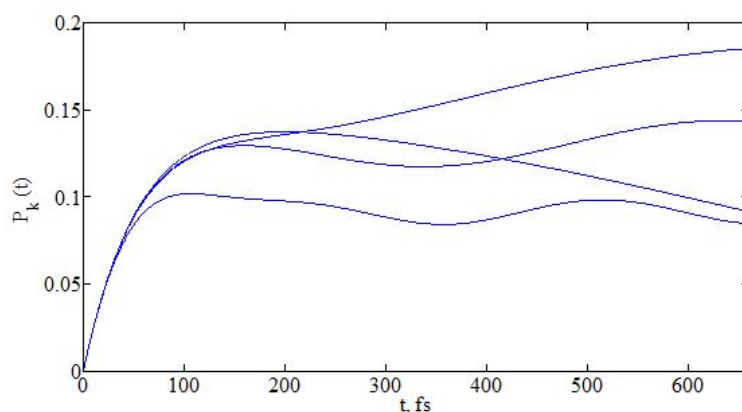


Рис. 4. Динамика заселенности уровней квазиконтинуума с энергиями -0.015 эВ; -0.005 эВ; 0 эВ; 0.01 эВ, отсчитываемыми от резонанса: начальный период времени

На рис. 3 представлена временная зависимость заселенности основного и возбужденного резонирующих уровней. Вначале их заселенности принимают сопоставимые значения за счет резонансного воздействия поля. Далее заселенности монотонно снижаются за счет распада в квазиконтинуум.

На рис. 4, 5 показаны результаты расчета динамики заселенности четырех выделенных состояний квазиконтинуума. Рис. 4 более подробно показывает начальный период возбуждения квазиконтинуума, стартующий с нулевых заселенностей. Рис. 5 отражает глобальную

динамику заселения квазиконтинуума, носящую характер затухающих осцилляций вокруг асимптотического значения заселенности. Финальные заселенности уровней соответствуют значениям, представленным на рис. 2.

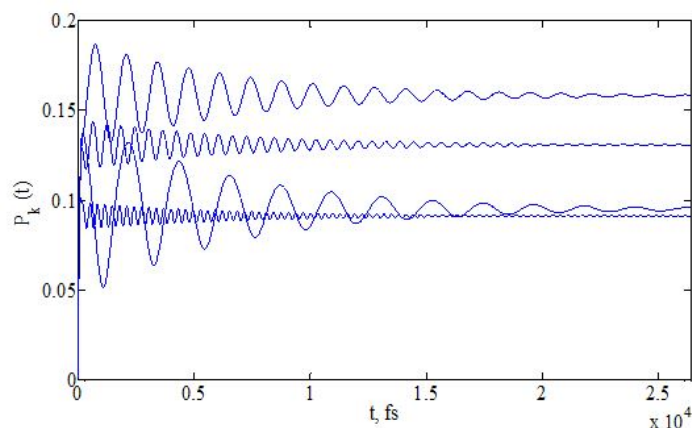


Рис. 5. Динамика заселенности уровней квазиконтинуума с энергиями -0.015 эВ; -0.005 эВ; 0 эВ; 0.01 эВ, отсчитываемыми от резонанса: глобальная динамика

Отметим принципиальное отличие полученного асимметричного распределения от линейного профиля Фано. В случае линейного резонанса Фано интерференционный провал образуется при определенных значениях сканирующей частоты. В нелинейном резонансе частота внешнего поля фиксирована, а асимметрия распределения заселенности квазиконтинуума обусловлена совместным действием нелинейности и интерференции.

4. Заключение

Проведенное исследование показывает важность интерференции каналов при нелинейном резонансном возбуждении дискретного уровня на фоне плотной зоны уровней. Отмечается возможность формирования асимметричного профиля за счет интерференции, характерной для резонансов Фано. Приведено динамическое описание формирования резонанса, показывающее возможность управления формой заселенности квазиконтинуума в широких пределах за счет изменения отстройки частоты внешнего поля и его интенсивности. Важно отметить, что оптически перестраиваемый резонанс на фоне континуума является, в частности, моделью системы, состоящей из нанопроводника и примесных атомов, обеспечивающих дискретные состояния на фоне континуума [18]. Это позволяет провести экспериментальное исследование нелинейной динамики резонанса Фано, используя лазерное поле оптического диапазона. Проведенное нами исследование существенно опиралось на монохроматичность и квазирезонансность внешнего воздействия. В то же время наибольший интерес представляет изучение динамики наносистем под действием фемтосекундных импульсов. Для столь коротких лазерных импульсов резонансное приближение становится слишком грубым, и требуется использовать иные теоретические схемы анализа, включая прямое численное моделирование динамики.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и образования РФ (задание № 3.9890.2017/8.9).

Литература

1. Ott C., Kaldun A., Raith P., Meyer K., Lauz M., Evers J., Keitel C.H., Green C.H., Pfeifer T. Lorentz meets Fano in spectral line shapes: A universal phase and its laser control // Science. 2013. V. 340 P. 716–720.

2. *Wickenhauser M., Burgdörfer J., Krausz F., Drescher M.* Time resolved Fano resonances // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 94, N 023002.
3. *Mercouris Th., Komninou Y., Nicolaidis C.A.* Time-dependent formation of the profile of the He 2s2p1Po state excited by a short laser pulse // *Phys. Rev.* 2007 V. A 75, N 013407; Erratum *Phys. Rev. A.* 2013 V. 87, N 069905. <https://journals.aps.org/pra/abstract/10.1103/PhysRevA.87.069905>
4. *Nicolaidis C.A., Mercouris Th., Komninou Y.* Time-dependent formation of the profile of resonance atomic states and its dependence on the duration of ultrashort pulses from free-electron lasers // *Phys. Rev. A.* 2009. V. 80, N 055402.
5. *Chu W.C., Lin C.D.* Theory of ultrafast autoionization dynamics of Fano resonances // *Phys. Rev. A.* 2010. V. 82, N 053415.
6. *Argenti L., Lindroth E.* Ionization branching ratio control with a resonance attosecond clock // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 105, N 053002.
7. *Argenti L., Pazourek R., Feist J., Nagele S., Liertzer M., Persson E., Burgdörfer J., Lindroth E.* Photoionization of helium by attosecond pulses: Extraction of spectra from correlated wave functions // *Phys. Rev. A.* 2013. V. 87, N 053405.
8. *Wang He, Chini M., Chen S., Zhang C.-H., He F., Cheng Y., Wu Yi, Thumm Uwe, Chang Z.* Attosecond time-resolved autoionization of argon // *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 105, N 143002.
9. *Kaldun A., Blättermann A., V. Stooß, Donsa S., Wei H., Pazourek R., Nagele S., Ott C., Lin C. D., Burgdörfer J., Pfeifer T.* Observing the ultrafast buildup of a Fano resonance in the time domain // *Science.* 2016. V. 354. P. 738–741.
10. *Gruson V., Barreau L., Jiménez-Galan B., Risoud F., Caillat J., Maquet A., Carré B., Lepetit F., Hergott J. -F., Ruchon T., Argenti L., Taïeb R., F. Martín, P. Salières.* Attosecond dynamics through a Fano resonance: Monitoring the birth of a photoelectron // *Science.* 2016. V. 354. P. 734–738.
11. *Wickenhauser M., Burgdörfer J., Krausz F., Drescher M.* Attosecond streaking of overlapping Fano resonances // *J. Mod. Opt.* 2006. V. 53. P. 247–257.
12. *Wirth A., Hassan M.Th., Grguraš I., Moulet J.T. Gagnon A., Luu T., Pabst S., Santra R., Alahmed Z.A., Azzeer A.M., Yakovlev V.S., Pervak V., Krausz F., Goulielmakis E.* Synthesized light transients // *Science* 2011. V. 334. P. 195–200.
13. *Hassan M.Th., Wirth A., Grguraš I., Moulet A., Luu T.T., Gagnon J., Pervak V., Goulielmakis E.* Invited Article: Attosecond photonics: Synthesis and control of light transients // *Rev. Sc. Instr.* 2012. V. 83, N 111301.
14. *Bixon M., Jortner J.* Intramolecular radiation transitions // *J. Chem Phys.* 1968. V. 48. P. 715–726.
15. *Kiröla E., Eberly J. H.* Quasicontinuum effects in molecular excitation // *J. Chem. Phys.* 1985. V. 82. P. 1841–1854.
16. *Акулин В. М.* Динамика сложных квантовых систем. М.: Наука, 2009. С. 97.
17. *Barnett S.M., Radmore P.M.* Methods in theoretical optics. Clarendon Press, Oxford, 1997.
18. *Boretz Y., Ordonez G., Tanaka S., Petrosky T.* Optically tunable bound states in continuum // *Phys, Rev. A.* 2014. V. 90, N 023853(9).

References

1. *Ott C., Kaldun A., Raith P., Meyer K., Laux M., Evers J., Keitel C.H., Green C.H., Pfeifer T.* Lorentz meets Fano in spectral line shapes: A universal phase and its laser control. *Science.* 2013. V. 340 C. 716–720.

2. *Wickenhauser M., Burgdörfer J., Krausz F., Drescher M.* Time resolved Fano resonances. *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 94, N 023002.
3. *Mercouris Th., Komninos Y., Nicolaidis C.A.* Time-dependent formation of the profile of the He 2s2p1Po state excited by a short laser pulse. *Phys. Rev.* 2007 V. A 75, N 013407; Erratum *Phys. Rev. A.* 2013 V. 87, N 069905. <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.87.069905>
4. *Nicolaidis C.A., Mercouris Th., Komninos Y.* Time-dependent formation of the profile of resonance atomic states and its dependence on the duration of ultrashort pulses from free-electron lasers. *Phys. Rev. A.* 2009. V. 80, N 055402.
5. *Chu W.C., Lin C.D.* Theory of ultrafast autoionization dynamics of Fano resonances. *Phys. Rev. A.* 2010. V. 82, N 053415.
6. *Argenti L., Lindroth E.* Ionization branching ratio control with a resonance attosecond clock. *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 105, N 053002.
7. *Argenti L., Pazourek R., Feist J., Nagele S., Liertzer M., Persson E., Burgdörfer J., Lindroth E.* Photoionization of helium by attosecond pulses: Extraction of spectra from correlated wave functions. *Phys. Rev. A.* 2013. V. 87, N 053405.
8. *Wang He, Chini M., Chen S., Zhang C.-H., He F., Cheng Y., Wu Yi, Thumm Uwe, Chang Z.* Attosecond time-resolved autoionization of argon. *Phys. Rev. Lett.* 2010. V. 105, N 143002.
9. *Kaldun A., Blättermann A., V. Stooß, Donsa S., Wei H., Pazourek R., Nagele S., Ott C., Lin C. D., Burgdörfer J., Pfeifer T.* Observing the ultrafast buildup of a Fano resonance in the time domain. *Science.* 2016. V. 354. P. 738–741.
10. *Gruson V., Barreau L., Jiménez-Galan B., Risoud F., Caillat J., Maquet A., Carré B., Lepetit F., Hergott J. -F., Ruchon T., Argenti L., Taïeb R., F. Martín, P. Salières.* Attosecond dynamics through a Fano resonance: Monitoring the birth of a photoelectron. *Science.* 2016. V. 354. P. 734–738.
11. *Wickenhauser M., Burgdörfer J., Krausz F., Drescher M.* Attosecond streaking of overlapping Fano resonances. *J. Mod. Opt.* 2006. V. 53. P. 247–257.
12. *Wirth A., Hassan M.Th., Grguraš I., Moulet J.T. Gagnon A., Luu T., Pabst S., Santra R., Alahmed Z.A., Azzeer A.M., Yakovlev V.S., Pervak V., Krausz F., Goulielmakis E.* Synthesized light transients. *Science* 2011. V. 334. P. 195–200.
13. *Hassan M.Th., Wirth A., Grguraš I., Moulet A., Luu T.T., Gagnon J., Pervak V., Goulielmakis E.* Invited Article: Attosecond photonics: Synthesis and control of light transients. *Rev. Sc. Instr.* 2012. V. 83, N 111301.
14. *Bixon M., Jortner J.* Intramolecular radiation transitions. *J. Chem Phys.* 1968. V. 48. P. 715–726.
15. *Kiröla E., Eberly J. H.* Quasicontinuum effects in molecular excitation. *J. Chem. Phys.* 1985. V. 82. P. 1841–1854.
16. *Akulin V. M.* Dynamics of Complex Quantum Systems. Nauka, 2009. P. 97.
17. *Barnett S.M., Radmore P.M.* Methods in theoretical optics. Clarendon Press, Oxford, 1997.
18. *Boretz Y., Ordonez G., Tanaka S., Petrosky T.* Optically tunable bound states in continuum. *Phys. Rev. A.* 2014. V. 90, N 023853(9).

Поступила в редакцию 15.11.2017