

ВІДГУК
офіційного опонента
на дисертаційну роботу Столярова Євгена Володимировича «Транспорт фотонів у одновимірних хвилевих та неадіабатична молекулярна динаміка», подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 – оптика, лазерна фізика

Розуміння процесів взаємодії світла та матерії на квантовому рівні представляються дуже **актуальними** для багатьох фізичних досліджень. Сучасний рівень технологій дає змогу працювати зі світлом та матерією на рівні одиночних фотонів та окремих квантових випромінювачів. Фотони можуть використовуватись для обміну квантовою інформацією між окремими користувачами різної природи, які з'єднуються хвилями, що забезпечують обмін фотонами у квантовій мережі майже без втрат. В модифікованому електро-магнітному середовищі посилюється взаємодія між світлом та матерією. Взаємодія між світлом та квантовими випромінювачами дає змогу здійснювати передачу квантового стану між полем та випромінювачем, що є вкрай важливим для реалізації багатобитних квантових операцій. Швидкий технологічний розвиток стимулює теоретичні дослідження хвилевих систем та можливих напрямків їхнього застосування. До того ж, вивчення фотонного транспорту в хвилях з квантовими випромінювачами має ще й фундаментальний аспект, оскільки такі системи є прикладом систем з сильними міжчастинковими кореляціями. Останніми роками сформувався новий напрям квантової оптики – **квантова електродинаміка у хвилях**. Використання повністю квантових підходів для моделювання систем, що складаються з великої кількості частинок потребує значних обчислювальних ресурсів і в багатьох випадках практично неможливе. Тому для моделювання молекулярних систем використані змішані квантово-класичні підходи. Розробка та удосконалення подібних методів також представляється **актуальною**.

Мета дослідження полягала у вивченні взаємодії фотонних хвильових пакетів з локалізованими квантовим випромінювачами. Одна з основних цілей роботи є побудова нового теоретичного підходу для опису динаміки в молекулярних системах, який послідовно враховує кореляційні ефекти та явище декогеренції.

Зміст представленої дисертації викладений в роботі яка містить анотацію, вступ та п'ять розділів основної частини, висновки, чотири додатки, перелік посилань, та додаток з переліком публікацій автора. Основна частина містить 29 рисунків та 1 таблицю. Загальний обсяг дисертації становить 188 сторінок.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дослідження, сформульовано мету та задачі, показано наукову та практичну цінність отриманих результатів.

У **першому розділі** розглядається взаємодія окремого дворівневого атома (кубіта) з електромагнітним полем, що поширюється в одновимірному

хвилеводі. Базуючись на гамільтоніані що враховує в загальному випадку взаємодію окремого кубіта з полем хвилеводу безпосереднь отримано важливий результат, що статистика відбитих фотонів вже не є пуассонівською. Знайдена поведінка відповідає субпуассонівській статистиці. Контролюючи взаємодію між кубітом та модою хвилеводу, можна контролювати статистику випромінювання, що відбилось від кубіта. Дворівневий атом можна використовувати як регульоване джерело суб- чи суперпуассонівського світла.

У **другому розділі** вивчається динаміка розсіяння одно- та двофотонних хвильових пакетів на дворівневому атомі (кубіті). Для опису цієї системи використовується гамільтоніан введений в першому розділі. Теоретичні розрахунки відмічають мінімум функції розподілу фотонів, що пройшли кубіт при нульовому значенні хвильового вектора, тоді як «крила» початкового розподілу проходять кубіт без істотних змін. Появу від'ємних значень функції розподілу розсіяних фотонів також можна пояснити *антикореляцією* станів кубіта та поля хвилевода. Коли кубіт у збудженому стані, тобто поглинув фотон, поле хвилевода буде у вакуумному стані, оскільки інших збуджень у системі немає. У протилежному випадку, коли кубіт знаходиться в основному стані, у хвилеводі знаходиться один фотон. Далі розглядається розсіяння двофотонних хвильових пакетів на кубіті, що в початковий момент часу знаходиться в основному стані. Важливим представляється **виникнення від'ємних значень функції розподілу після розсіяння фотона на дворівневому атомі**. Оскільки від'ємні ймовірності не мають класичної інтерпретації то це означає, що функція розподілу у координатно-імпульсному (фазовому) просторі є розподілом квазіймовірності.

У **третьому розділі** вивчається поширення одно- та двофотонних хвильових пакетів у хіральному (однонаправленому) хвилеводі та їхнє розсіяння на локалізованому випромінювачі, який складається з одномодового резонатора, з'єднаного з дворівневим атомом (кубітом). Спочатку розглядається взаємодія системи резонатор-кубіт із входнім імпульсом у однофотонному стані. Використовуючи рівняння руху для операторів, , отримується система рівнянь руху для амплітуд ймовірностей, які входять в одночастинкову хвильову функцію. Ця система рівнянь розв'язана аналітично. Слід відмітити, що задачі розсіяння одно- та двофотонних хвильових пакетів на системі резонатор-кубіт **вдалось знайти точні аналітичні вирази для амплітуд ймовірностей**, що дало змогу вивчити динаміку розсіяння хвильового пакета та наглядно продемонструвати осциляції Рабі населеностей резонатора та кубіта, виникнення фотонної блокади в системі резонатор-кубіт, та утворення заплутаного стану розсіяних фотонів. Вивчалася також динаміка населеності резонатора та кубіта. Розрахунки проведені в дисертації показують, що коротші входні імпульси ефективніше збуджують і резонатор, і кубіт. Розглядається також довгочасова еволюція системи, коли всі процеси розсіяння завершилися. При ввімкненій взаємодії між резонатором та кубітом спектр розсіяного хвильового пакета відрізняється від спектра входного. Обчислення показують, що найбільш виразна модифікація спектра вихідного хвильового пакету відбувається коли частота близька до однофотонних резонансних ча-

стот системи резонатор-кубіт. Продемонстровано, що стан пари нескорельованих фотонів після розсіяння на резонаторі, що взаємодіє з дворівневим атомом (кубітом), є частотно-заплутаним. Нелінійність системи резонатор-кубіт породжує ефективну фотон-фотонну взаємодію, що призводить до частотно-го заплутування розсіяних фотонів. Частотне заплутування фотонів можна кількісно визначити. Це також представляється дуже важливим результатом.

Підхід розроблений в попередньому розділі застосовано в **четвертому розділі** для більш прикладної задачі випромінювання стану кубіта однофотонним імпульсом. Тут досліджується дисперсне зчитування стану кубіта у граничному випадку вимірюючого хвильового пакету в однофотонному стані. Із загальних міркувань зроблено висновок, що для заданого часу вимірювання та різниці частот кубіта та резонатора має існувати комбінація значень швидкості витікання фотона з резонатора та сили зв'язку між кубітом та резонатором, коли досягається максимальне значення контрасту. Для ілюстрації цього важливого висновку показані залежності контрасту зчитування від введених параметрів для деяких значень часу. Обчислення також показують, що більший контраст досягається використанням довших імпульсів та більших значень різниці частот кубіта та резонатора.

У **п'ятому розділі** розглядається новий квантово-класичний підхід для моделювання неадіабатичної електронно-ядерної динаміки в молекулярних системах. При використанні методів симуляції *ab-initio* неадіабатичної молекулярної динаміки, енергетичні поверхні та вектори неадіабатичного зв'язку обчислюються для певного залежного від часу положення ядер, Тут вдалось послідовно врахувати декогеренцію в моделюванні неадіабатичної динаміки; невелика модифікація алгоритму Таллі (а це один з найвживаніших алгоритмів моделювання неадіабатичної динаміки) дала змогу отримати чудові результати в тестових задачах (навіть там, де оригінальний алгоритм взагалі не працює). І хоча це, по суті, тільки перший крок, і про моделювання процесів в реальних молекулах не йшлося, але отримані результати вселяють оптимізм, що такий підхід (з певними доопрацюваннями) все ж буде адекватно працювати і для складних молекулярних систем.

Якщо узагальнити отримані результати то можна стверджувати що в представлений роботі показано, що: а) кубіт можна використовувати як джерело світла із заданою (регульованою) статистикою. б) статистика фотонів, відбитих кубітом, завжди субпуассонівська, тоді як статистика фотонів, що пройшли, може бути як суб- так і суперпуассонівською в залежності від відстані між однофотонними компонентами вхідного імпульсу та сили взаємодії кубіта з полем хвилеводу, в) отримані точні аналітичні вирази амплітуд ймовірностей, що задають еволюцію повного квантового стану системи хвильвід-резонатор-кубіт у випадку одно- та двофотонного вхідногохвильового пакету, г) продемонстровані фундаментальні обмеження на метод дисперсного зчитування кубіта вимірюючим однофотонним сигналом, д) запропоновано новий формалізм для опису корельованої електронно-ядерної динаміки в мо-

лекулярних системах, в якому послідовно враховані ефекти декогеренції, на основі якого запропоновано та реалізовано алгоритм моделювання неадіабатичної молекулярної динаміки. Представлена робота цілісна як за стилем так і за змістом. Використані методи повністю адекватні поставленим завданням. Але, як звичайно, до любої, особливо завершеної роботи можна придертися і знайти окремі недоліки. До недоліків можна віднести наступне:

1. Для моделювання молекулярних систем використовують змішані квантово-класичні підходи. Основна ідея цих методів полягає у тому, що еволюція ядерних ступеней вільності описується класичними (ньютонівськими) рівняннями руху, а динаміка електронної підсистеми описується квантовомеханічно. Але при цьому можна врахувати і деякі квантові стани ядер (наприклад при русі електронів в центральному полі можна використати додаткові інтеграли руху через відповідні комутаційні співвідношення).
2. Квазідвовимірна геометрія призводить до інтерференції між полем яке збуджує випромінює і полем яке цей атом перевипромінює. При цьому не враховується зміна квантового стану самого атома а тільки враховується можливість того що атом може пропускати або відбивати фотон. Але це питання більше не до автора дисертації а до примінення використаної моделі.
3. Двохрівневий атом- кубіт є нелінійною системою оскільки здатен поглинати тільки одне збудження, що породжує ефект фотонної блокади коли поява збудження в системі пригнічує поглинання ще одного збудження. Як при цьому послідовно інтерпретувати результати у випадку короткого часу, коли система не досягає ще свого стаціонарного стану.

Вищевказані недоліки не зменшують значимості цілого ряду нових та цікавих результатів, вперше отриманих дисертантом, і не впливають на загальне позитивне враження від роботи. Результати проведених досліджень викладені послідовно і чітко. Роботи по темі дисертації опубліковані в самих престижних міжнародних журналах. Теоретичне значення і практична цінність основних положень і висновків дисертаційної роботи не викликає сумнівів. Автореферат дисертації повністю відповідає її змісту.

Вважаю, що, дисертаційна робота Є. В. Столярова за науковим рівнем, обсягом, новизною та актуальністю проведених досліджень відповідає всім вимогам, що ставляться до кандидатських дисертацій, а її автор заслуговує присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 – оптика, лазерна фізика.

Член-кореспондент НАН України,
доктор фіз.-мат.наук, професор

Б. І. Лев