

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Столярова Євгена Володимировича

«ТРАНСПОРТ ФОТОНІВ У ОДНОВИМІРНИХ ХВИЛЕВОДАХ ТА НЕАДІАБАТИЧНА МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА»,

подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.05 – оптика, лазерна фізика

В дисертаційній роботі Євгена Володимировича Столярова досліджується динаміка розсіяння фотонних та ядерних хвильових пакетів на квантових випромінювачах у одновимірних хвилеводах та на перетинах ізоенергетичних поверхонь у молекулярних системах.

Актуальність теми роботи.

Розуміння процесів взаємодії світла та матерії на квантовому рівні є вкрай важливим для таких сфер досліджень як нанофотоніка, квантові обчислення та інформатика, лазерна спектроскопія, фотофізика та фотохімія. Сучасні технології дають змогу працювати зі світлом та матерією на рівні одиничних фотонів та окремих випромінювачів (атомів, молекул, напівпровідникових квантових точок, штучних атомів на контактах Джозефсона, тощо). Фотони можна використати як переносники квантової інформації між вузлами квантових мереж, які з'єднуються хвилеводами. У хвилеводах випромінювання локалізується в поперечній до напрямку поширення площині, завдяки чому посилюється взаємодія між світлом та речовиною. Це дає змогу здійснювати швидку передачу квантового стану між полем та випромінювачем, що є важливим для виконання операцій квантової логіки. Експериментальні демонстрації різноманітних хвилеводних систем вказують на перспективність використання цих систем як платформи для створення пристроїв квантової обробки інформації. Сформувався новий напрям квантової оптики — квантова електродинаміка в хвилеводі, який охоплює різноманітні задачі, що пов'язані з дослідженням взаємодії світла та матерії у хвилеводах.

Вивчення фотофізичних та фотохімічних процесів, а також лазерна спектроскопія та матеріалознавство потребують ефективних методів симуляції неадіабатичної молекулярної динаміки. Для опису молекулярної динаміки зазвичай використовують наближення Борна-Оппенгеймера, яке полягає в тому, що завдяки великій різниці мас ядер та електронів, їхню динаміку можна розглядати окремо. У фотоіндукованих процесах стани ядер та електронів можуть ставати заплутаними і наближення Борна-Оппенгеймера перестає працювати і треба застосовувати неадіабатичну електронно-ядерну динаміку. Оскільки використання повністю квантових підходів для моделювання систем,

що складаються з великої кількості частинок, потребує значних обчислювальних ресурсів, для моделювання складних молекулярних систем використовують квантово-класичні підходи. В цих підходах ядерні ступені вільності описується класичними рівняннями руху, а динаміка електронної підсистеми описується методами квантової теорії. Моделювання неадіабатичних процесів у молекулярних системах є важливим інструментом теоретичного дослідження фотоіндукованих процесів, наприклад, таких, як локалізація екситонів, чи перенос енергії та заряду в фотосинтетичних та фотовольтаїчних системах.

Актуальність роботи також підтверджується виконанням комплексом досліджень в рамках бюджетних тем «Нанофізика квантоворозмірних та низьковимірних структур, у тому числі на поверхні твердого тіла, в металоорганічних, полімерних та рідкокристалічних системах, молекулярна наноелектроніка» (№0107U002165), «Оптичні та транспортні властивості нелінійних і просторово обмежених систем» (№0107U002349), «Явища переносу і дисипації в нелінійних та обмежених середовищах» (№0112U003150), «Дослідження конденсованих систем на нанометровому рівні з метою з'ясування розмірних фізичних ефектів, розроблення фізичних основ нових електронних і іонних технологій» (0112U002509), «Релаксаційні та розмірні явища в лінійних та нелінійних середовищах» (0117U002613), «Фундаментальні процеси, що визначають властивості новітніх фізичних об'єктів та матеріалів для електроніки, оптоелектроніки, фотоніки та спінтроніки» (0117U002612).

Структура та об'єм дисертації.

Дисертація складається з анотації, вступу, п'яти розділів основної частини, висновків, чотирьох додатків, переліку посилань зі 192 найменувань, та додатку з переліком публікацій автора. Основна частина дисертації містить 29 рисунків та 1 таблицю. Загальний обсяг роботи становить 188 сторінок.

У *вступі* обґрунтовано актуальність теми дослідження, сформульовано мету та задачі, показано наукову та практичну цінність отриманих результатів. Вказано зв'язок роботи з науковими темами, надано інформацію про публікації за темою дисертації, особистий внесок здобувача, апробацію результатів роботи, а також структуру та обсяг дисертації.

У *першому розділі* досліджено взаємодію хвильового пакету в когерентному стані з дворівневим атомом у одновимірному хвилеводі. Отримано рівняння еволюції населеності збудженого стану атома. Показано, що характер збудження атома залежить від середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі. Досліджено статистичні властивості розсіяного випромінювання. Встановлено, що при великій кількості фотонів у вхідному хвильовому пакеті та частина

випромінювання, що пройшла атом, має суперпуассонівську статистику, тоді як відбите світло може бути як суб- так і суперпуассонівським залежно від величини параметра зв'язку між атомом та хвилеводом.

У *другому розділі* вивчається розсіяння хвильових пакетів у одно- та двофотонних станах на дворівневому атомі (кубіті). Для опису розсіяння використано метод функції розподілу фотонної густини у координатно-імпульсному (фазовому) просторі, яка є аналогом класичної мікроскопічної функції розподілу. Показано, що після розсіяння однофотонного хвильового пакету його середня функція розподілу набуває від'ємних значень у деяких областях фазового простору навіть для позитивної початкової функції розподілу. Отримано вирази для просторової та спектрального розподілів розсіяних фотонів.

У *третьому розділі* розглядається взаємодія одно- та двофотонних фоківських імпульсів із системою резонатор-кубіт у хвилеводі. Для опису еволюції квантового стану системи виписується залежна від часу хвильова функція. Виведено та розв'язано (як аналітично, так і числовими методами) систему рівнянь еволюції амплітуд ймовірностей, що описують стан системи. Це дало змогу дослідити зміну спектру хвильового пакета під час взаємодії із системою резонатор-кубіт. Показано виникнення фотонної блокади в системі резонатор-кубіт. Продемонстровано, що стан розсіяних фотонів є заплутаним, що відрізняє його від сепарабельного стану вхідних фотонів.

У *четвертому розділі* розглядається дисперсне зчитування стану кубіта за допомогою фотодетектора в граничному випадку однофотонного вимірюючого імпульсу. Зв'язок кубіта та резонатора описується гамільтоніаном Рабі. Швидко осцилюючі доданки в гамільтоніані взаємодії кубіта та резонатора вважаються збуренням і наближено виключаються унітарним перетворенням. Це призводить до зсуву ефективної частоти резонатора, який можна використати для покращення зчитування. Як і в *четвертому розділі*, для опису розсіяння фотона виводяться та розв'язуються рівняння руху амплітуд ймовірностей, що описують повний квантовий стан системи.

У *п'ятому розділі* представлено новий підхід до опису скорельованої електронно-ядерної динаміки в молекулярних системах. Вводиться ефективний гамільтоніан, який описує переходи між адіабатичними електронними рівнями. Використовуючи цей гамільтоніан виведено рівняння еволюції населеностей адіабатичних рівнів та рівняння руху ядер. Показано, що у випадку сильної декогеренції, ці рівняння стають марківськими. Ґрунтуючись на запропонованому теоретичному описі, створено алгоритм для моделювання неадіабатичної молекулярної динаміки. Продемонстровано ефективність запропонованого алгоритму на тестових задачах Таллі.

У **висновках** підсумовуються основні результати дисертаційної роботи. В **додатки** винесені технічні деталі.

Структура та зміст автореферату повністю відповідають основним положенням дисертації. Оформлення дисертаційної роботи та автореферату відповідає вимогам пунктів 9 та 11-13 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України №567 від 24.07.2013р.

Достовірність викладених в дисертації результатів забезпечуються застосуванням обґрунтованих та перевірених теоретичних підходів та чисельних методів, відповідністю між отриманими аналітичними розв'язками та результатами моделювання на комп'ютері.

Повнота викладення результатів дисертації.

Наукові результати, представлені в дисертації, опубліковані в 5 статтях у провідних міжнародних журналах Physical Review A (4 роботи) та The Journal of Chemical Physics. Одна з робіт (у Physical Review A) зроблена здобувачем без співавторів. Результати роботи також доповідались на 7 міжнародних наукових конференціях та увійшли у 5 збірників тез конференцій. Статті, що увійшли до дисертації, згідно до даних Google Scholar, вже процитовано 29 разів.

Зауваження.

Під час читання роботи в мене виникло пару зауважень.

Твердження « Отже, контролюючи взаємодію між кубітом та модою хвилеводу, можна контролювати статистику випромінювання, що відбилося від кубіта» на стор 45 мені здається очікуваним. Так само, перше речення у висновку номер 1 на стор 153.

У параграфі 5.3.1 дисертації спектральний розподіл вхідного імпульсу моделюється гауссовою функцією. Було б доцільно навести аргументи на користь такого наближення.

На сторінці 150 автор пише, що кількість доданків N_m дорівнювала 6. Цікаво, чому саме обрано таку кількість? Що буде із часом обчислень та збіжністю, якщо $N_m=4$ або $N_m=8$?

Я помітив в роботі декілька друкарських помилок. Наприклад, стор. 33 « Підстановка виразів (??) ...»

стор 41 «...більше одного сбудження...»

стор 50 «... - вакуумний стану ..»

стор 53 «... режекторний фільтр...»

означення матриць Паулі повторюється на стор 28 та 75

стор 100 « ... вимірюючим сигналом є хвильовий пакетом ...»

стор 163 «... гамільтоніан у діабатичному представленні ...»

Слід, проте, зауважити, що зроблені зауваження не ставлять під сумнів обґрунтованість, достовірність, наукову новизну і практичне значення результатів та висновків дисертаційної роботи і не впливають на її загальну високу оцінку.

Загальна характеристика роботи.

Оцінюючи дисертаційну роботу Євгена Володимировича Столярова в цілому, хочу відзначити, що вона робить суттєвий внесок у розуміння динаміки розсіяння фотонних та ядерних хвильових пакетів на квантових випромінювачах у одновимірних хвилеводах та на перетинах ізо-енергетичних поверхонь у молекулярних системах. На мою думку, результати дослідження можуть бути використані як в подальших фундаментальних дослідженнях, так і в практичних застосуваннях, зокрема, у нанофотоніці, квантових обчисленнях та інформатиці, лазерній спектроскопії, фотофізиці та фотохімії. Робота є завершеним науковим дослідженням, виконаним на високому сучасному професійному рівні. Схоже, що автору вдалося слідувати девізу, наведеному на початку роботи «Per aspera ad astra». Вважаю, що за обсягом, актуальністю, науковою новизною, практичною цінністю, та достовірністю результатів, робота «Транспорт фотонів у одновимірних хвилеводах та неадіабатична молекулярна динаміка» задовольняє всім вимогам «Порядку присудження наукових ступенів», затверджені Постановою Кабінету Міністрів України №567 від 24.07.2013р. (зі змінами, внесеними згідно з Постановами Кабінету Міністрів України №656 від 19.08.2015р., №1159 від 30.12.2015р., №567 від 27.07.2016р., №943 від 20.11.2019, та №607 від 15.07.2020 р.), а її автор Столяров Євген Володимирович, безумовно, заслуговує на присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 – оптика, лазерна фізика.

доктор фізико-математичних наук, професор,
завідувач кафедри теоретичної фізики
фізичного факультету
Київського національного університету ім. Т. Шевченка
Решетняк В. Ю.

Підпис Решетняка В. Ю. засвідчую: