

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0421U100929

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 15-04-2021

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Столяров Євген Володимирович

2. Stoliarov Yevhen Volodymyrovych

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., 01.04.05

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 01.04.05

**Назва наукової спеціальності:** Оптика, лазерна фізика

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 08-04-2021

**Спеціальність за освітою:** Фізика

**Місце роботи здобувача:** Інститут фізики Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417302

**Місцезнаходження:** проспект Науки, буд. 46, м. Київ, Київська обл., 03680, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 26.159.01

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417302

**Місцезнаходження:** проспект Науки, буд. 46, м. Київ, Київська обл., 03680, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417302

**Місцезнаходження:** проспект Науки, буд. 46, м. Київ, Київська обл., 03680, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.31.27

**Тема дисертації:**

1. Транспорт фотонів у одновимірних хвилеводах та неадіабатична молекулярна динаміка.
2. Photon transport in one-dimensional waveguides and non-adiabatic molecular dynamics.

**Реферат:**

1. В роботі вивчається динаміка розсіяння фотонних та ядерних хвильових пакетів на квантових випромінювачах у одновимірних хвилеводах та на перетинах ізоенергетичних поверхонь у молекулярних системах. Досліджено взаємодію хвильового пакету в когерентному стані з дворівневим атомом (кубітом) в одновимірному хвилеводі. Встановлено, що за великої середньої кількості фотонів у вхідному імпульсі відбите випромінювання може бути як суб- так і суперпуассонівським в залежності від сили зв'язку між кубітом та хвилеводом. Для опису розсіяння хвильових пакетів у одно- та двофотонних станах на кубіті використано метод функції розподілу фотонної густини у координатно-імпульсному просторі. Показано, що середня функція розподілу розсіяного однофотонного хвильового пакету набуває від'ємних значень у певних областях фазового простору навіть за умови позитивної початкової функції розподілу. Отримано аналітичні вирази для просторової та спектральної густини розсіяних фотонів. Досліджено розсіяння двофотонного хвильового пакета на резонаторі, зв'язаному з кубітом. Отримано та розв'язано рівняння руху для амплітуд ймовірностей, що описують квантовий стан системи. Встановлено, що стан розсіяних фотонів є заплутаним,

що якісно відрізняє його від сепарабельного стану вхідних фотонів. Розглянуто дисперсне зчитування стану кубіта за допомогою фотодетектора в граничному випадку однофотонного вимірюючого імпульсу. Продемонстровані фундаментальні обмеження на такий метод дисперсного зчитування кубіта. Представлено новий підхід до опису скорельованої електронно-ядерної динаміки в молекулярних системах. Використовуючи гамільтоніан, який описує переходи між адіабатичними електронними рівнями, та формалізм оператора густини, отримано рівняння еволюції населеностей електронних адіабатичних рівнів та рівняння руху ядер. На основі запропонованого теоретичного підходу створено алгоритм для моделювання неадіабатичних процесів у молекулярних системах.

2. The thesis concerns the dynamics of scattering of photonic and nuclear wave packets on quantum emitters in one-dimensional waveguides and crossings of potential energy surfaces in molecular systems. The interaction of the coherent-state wave packet with a two-level atom (qubit) in a one-dimensional waveguide is studied. The evolution equation for the qubit excited state population is derived. It is demonstrated that the qubit excitation depends on the average photon number in the ingoing pulse. Statistics of the radiation scattered off the qubit is studied. It is found that for a large number of photons in the ingoing pulse, the transmitted radiation is described by the superpoissonian statistics, while the reflected radiation can feature either sub- or superpoissonian statistics depending on the coupling strength between the qubit and the waveguide. The photon density distribution function in phase (coordinate-momentum) space is used for the description of the scattering of single- and two-photon wave packets on a qubit. It is demonstrated that the average phase-space distribution function of the scattered single-photon wave packet acquires negative values in specific regions of phase space even in the case of the positive initial distribution. Analytical expressions for spatial and momentum-space (spectral) distributions of the scattered photons are derived. In the case of the two-photon ingoing wavepacket constituted by a pair of identical spatially-separated single-photon pulses, the equations of motion governing the evolution of the photon phase-space distribution function are derived and solved numerically. It is demonstrated that for the two-photon ingoing wave packet, the regions of negative values of the photon distribution function emerge only for specific values of the qubit-waveguide coupling and the distance between the single-photon components of the ingoing pulse. It is shown that the average number of scattered photons and its variance depends not only on the qubit-waveguide coupling strength and the distance between the single-photon ingoing pulses but also on the bandwidth of the latter. The time-dependent wavefunction of the system is employed for the description of the two-photon wave packet evolution in a one-dimensional waveguide coupled to a resonator-qubit system. The set of equations of motion governing the probability amplitudes, which describe the quantum state of the system, is derived and solved both analytically and numerically. This allows investigating a modification of the spectrum of the wave packet in the course of its interaction with the resonator-qubit system as well as the excitation dynamics of the latter. It is demonstrated that the probability of finding two excitations in the resonator-qubit system is significantly reduced compared to the case of the resonator uncoupled from the qubit, which indicates the photon blockade in this subsystem. It is shown that the spectrum of the scattered wave packet differs from the spectrum of the ingoing wave packet. Using the Schmidt decomposition, it is demonstrated that the scattered photons are entangled in contrast to the separable state of the ingoing photons. Dispersive readout of the qubit using the photodetector in the ultimate limit of the single-photon probe pulse is considered. Coupling between the qubit and the resonator is described by the Rabi Hamiltonian. Fast-oscillating terms in the qubit-resonator coupling Hamiltonian are treated as a perturbation and are eliminated using the unitary transformation resulting in the Bloch-Siegert shift in the resonator frequency. The advantages and limitations of the considered readout scheme is discussed in detail. The parameters of the system providing the maximal readout contrast are determined. Modeling the non-adiabatic processes in molecular systems is a requisite tool for the theoretical study of various photoinduced processes such as exciton localization, charge transfer in photosynthetic complexes and photovoltaic systems. The effective Hamiltonian, describing transitions between electronic adiabatic levels and quantum fluctuations along the classical nuclear trajectories, is introduced. The evolution equations governing the electronic occupation numbers and the nuclear degrees of freedom are derived using this Hamiltonian and the density operator formalism. It is shown that these equations become Markovian in the case of strong decoherence.

Equations of motion for the electronic occupations are studied in the non-Markovian regime as well. The algorithm for modeling the non-adiabatic molecular dynamics is implemented using the proposed theoretical approach.

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:**

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:**

**Підсумки дослідження:**

**Публікації:**

**Наукова (науково-технічна) продукція:**

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Чумак Олександр Олександрович
2. Chumak Oleksandr Oleksandrovyich

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.07

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Решетняк Віктор Юрійович
2. Reshetnyak Viktor Yu.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Лев Богдан Іванович

2. Lev Bohdan Ivanovych

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Рецензенти**

## **VIII. Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Яценко Леонід Петрович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Яценко Леонід Петрович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**



Юрченко Т.А.