КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН КАЗАНСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ФИЦ КазНЦ РАН

КОГЕРЕНТНАЯ ОПТИКА И ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

ХХ Юбилейная международная

молодежная научная школа

Казань, 27-29 октября 2021 г.

Сборник статей

Вып. ХХУ

<u>]]:::::::]]][[[]][[]]</u>[[]::::::][

КАЗАНЬ

2022

Научный редактор доктор физико-математических наук, академик АН РТ, профессор М.Х. Салахов

Когерентная оптика и оптическая спектроскопия [Электронный К57 pecypc]: XXV Юбилейная международная молодежная научная школа (Казань, 27–29 октября 2021 г.). Сборник статей. Вып. XXV / под ред. М.Х. Салахова. – Электрон. текстовые дан. (1 файл: 3,59 Мб). – Казань: университета, 2022. – 74 c. – Издательство Казанского Систем. требования: Adobe Acrobat Reader. Режим доступа: http://dspace.kpfu.ru/xmlui/bitstream/handle/net/168573/sbornik-COOS-2021.pdf. – Загл. с титул. экрана.

ISBN 978-5-00130-563-7

В данный сборник вошли статьи участников XXV Юбилейной международной молодежной научной школы «Когерентная оптика и оптическая спектроскопия».

Предназначается для студентов, аспирантов, научных работников, специализирующихся по естественнонаучным направлениям.

УДК 535 ББК 22.34

ISBN 978-5-00130-563-7

© Издательство Казанского университета, 2022

содержание

Валитова А.Ф., Газизов А.Р., Салахов М.Х.	
Плазмонные свойства и дисперсия мод на сплошной золотой метаповерхности	
с гексагональной структурой	5
Газизов А.Р., Харинцев С.С., Салахов М.Х.	
Моделирование электронной плотности состояний проводящих нитрида	
и оксинитридов циркония	8
Гайнутдинов Р.Х., Гарифуллин А.И., Хамадеев М.А.	
Квантово-электродинамические эффекты в фотонных кристаллах	
и управление энергией ионизации атомов	14
Гилязов Л.Р., Сибгатуллин М.Э., Арсланов Н.М.	
Влияние вейвлет-детрендирования на степень случайности шума.	
генерируемого квантовым ГСЧ	19
Гилязов Л.Р. Сибгатуллин М.Э. Арсланов Н.М.	
Расчет модели дифракционного элемента связи светового пучка с волноводом	
из нитрида кремния.	23
Придрица А. Н. НЕУОН Турни, НЕУОН Лой Умин	
Формирования плакситонных наноструктур за снат декорирования	
ψ ормирование плекситонных наноструктур за счет оекорирования интерфейсов келитовых тоцек $Ag_{3}S/SiO_{2}$ плагмонными нанонастипами Au	27
	21
Дерепко В.Н., Овчинников О.В., Смирнов М.С.	
Плазмон-экситонное взаимодеиствие в смесях квантовых точек CdS	20
и серебряных наносфер	32
Зинатуллин Э.Р., Королев С.Б., Голубева Т.Ю.	
Уменьшение ошибки телепортации с помощью кубического	
фазового затвора	37
Корюкин А.В.	
Квантовые модели для задач поиска минимального пути	42
Кук И.А., Дж. Гибни, Лопухова Е.А., Габитов И.Р.	
Гибридизация машинного обучения и интегрируемости модельных уравнений	
в оптоволоконных системах с нелинейностью	47
Мелвелева С.С., Гайлаш А.А., Мирошниченко Г.П., Киселев А.Л., Козубов А.В.	
Исследование динамики параметров стокса с учетом межмодового	
взаимодействия	52
Самаршев В.В. Митрофанова Т.Г.	
Одноимпульсное и запертое экситонное эхо в ансамбле полупроводниковых	
квантовых точек CdSe/CdS/ZnS	57

Сапарина С.В., Харинцев С.С.	
Химическая диагностика наноразмерных аморфных углеродных покрытий	
с помощью электроассистируемой спектроскопии гигантского	
комбинационного рассеяния света	61
Харламова Ю.А., Арсланов Н.М., Моисеев С.А.	
Оптимизация контролирующего поля для быстрой квантовой памяти	
в интегральной волноводно- резонаторной схеме	65
Черных Е.А., Харинцев С.С.	
Оптическое детектирование температуры стеклования тонкой полимерной	
пленки ПММА с помощью термоплазмонной метаповерхности	69

ПЛАЗМОННЫЕ СВОЙСТВА И ДИСПЕРСИЯ МОД НА СПЛОШНОЙ ЗОЛОТОЙ МЕТАПОВЕРХНОСТИ С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРОЙ

А.Ф. Валитова^{1,2}, А.Р. Газизов^{1,2}, М.Х. Салахов^{1,2}

¹ Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики Казань, 420008, ул. Кремлевская 16 ² Академия наук Республики Татарстан, Институт прикладных исследований Казань, 420111, ул. Баумана 20

1. Введение

Изучение поверхностных свойств метаповерхностей является одной из важнейших и интересных задач в фотонике. Это связано с возможностью наблюдения новых оптических явлений и их применения. Локализация электромагнитного поля на границах раздела металлвоздух и металл-фотонный кристалл приводит к проявлению таких оптических эффектов, как плазмон-поляритоны, одним из подвидов которых являются таммовские плазмон-поляритоны или оптические таммовские состояния (ОТС). Такие структуры были использованы в экспериментах по изучению поверхностно-усиленного (гигантского) комбинационного рассеяния света (ГКРС) [1-3], но не был проведен сравнительный анализ их оптических свойств в зависимости от структуры поверхностного слоя. Функциональность метаповерхностей можно расширить, рассмотрев применение различных вариаций поверхностей. Сильно локализованные поверхностные возбуждения на границе фотонного кристалла и металлического слоя обладают свойством резонансного взаимодействия излучения с неоднородностями, что приводит к возникновению плазмонного резонанса. Плазмоны при распространении испытывают ощутимое затухание. Плазмоны можно генерировать, используя брэгговские зеркала. Создание пространственно-неоднородных ФК на основе опалов значительно расширяет их функциональные возможности и область применения [4,5]. В работе [6] были исследованы плазмонные моды тонких пленок TiN, осажденных при определенных условиях. Использование таких материалов позволяет сфокусировать свет без наложения дополнительных условий на длину волны и поддерживать плазмонные поляритоны [7,8].

Результатом нашего исследования являются полученные дисперсионные соотношения для волнообразной метаповерхности Au. В данной работе исследованы плазмонные свойства и дисперсия мод в тонком плоском слое и волнообразной метаповерхности Au.

2. Параметры моделирования

В нашей работе рассмотрена тонкая волнообразная метаповерхность Au, геометрическая форма которой описана в работе [9]. В сплошных метаповерхностях, расположенных на границе опалоподобных фотонных кристаллов, возможно возбуждение поляризационно-чувствительной оптической моды [10]. Дисперсионные соотношения таких метаповерхностей были определены нами методом FDTD (метод конечных разностей во

временной области) с использованием граничных условий Блоха. Толщина слоя Au 40 нм. Набор диполей со случайными фазами и ориентацией был использован в качестве источника излучения в области моделирования. Затем для каждого значения параметра kx граничных условий были найдены частоты, на которых происходит резонанс электромагнитного поля.

3. Дисперсионные соотношения плазмонных мод

Одним из подвидов плазмон-поляритонов являются оптические таммовские состояния. Дисперсионная кривая таммовских плазмон-поляритонов вблизи центра запрещенной зоны фотонного кристалла была приведена в работе [11] с существенными ограничениями на область длин волн и геометрические параметры фотонного кристалла. В результате моделирования мы получили дисперсионные соотношения для мод уединенной волнообразной метаповерхности (при отсутствии фотонного кристалла). В нашей работе мы рассматриваем только первую (основную) зону Бриллюэна. Вблизи границ зоны Бриллюэна групповая скорость дисперсионных кривых стремится к нулю. Для сравнения мы построили дисперсионные соотношения для плоской метаповерхности Au той же толщины (рис.1а). В случае волнообразной метаповерхности (рис.1б) наличие периодичности приводит к возникновению дополнительных мод в высокочастотной области, которые аналогичны имеющимся низкочастотным модам.





С увеличением толщины метаповерхности Au наблюдается исчезновение низкочастотных четных мод. Полученные результаты демонстрируют возможность дизайна дисперсии оптических мод с помощью изменения толщины и/или периода волнообразной структуры данной метаповерхности. В случае с волнообразной метаповерхностью так же можно заметить небольшое смещение в значении частоты вблизи значений 0.6 ТГц и 1.2 ТГц.

4. Заключение

Мы рассмотрели дисперсионные соотношения для плоской и волнообразной метаповерхности Au. Нами установлено, что в волнообразной метаповерхности возникают дополнительные оптические моды, дисперсией которых мы можем управлять.

- 1. Mu W., Hwang D.-K., Chang R. P. H., Sukharev M., Tice D. B., Ketterson J. B. Surfaceenhanced Raman scattering from silver-coated opals // J. Chem. Phys. 2011. V. 134. P. 124312.
- 2. Stropp J., Trachta G., Brehm G., Schneider S. A new version of AgFON substrates for high-throughput analytical SERS applications // J. Raman Spectrosc. 2003. V. 34. P. 26–32.
- 3. Liu K., Sun C., Linn N. C., Jiang B., Jiang P. Wafer-scale surface-enhanced Raman scattering substrates with highly reproducible enhancement // J. Phys. Chem. C. 2009. V. 113. P. 14804.
- 4. Tandaechanurat A., Ishida S., Guimard D., Nomura M., Iwamoto S., Arakawa Y. Lasing oscillation in a three-dimensional photonic crystal nanocavity with a complete bandgap // Nature photonics. 2011. V. 5. P. 91–94.
- 5. Oulton R.F., Sorger V.J., Zentgraf T., Ma R.-M., Gladden C., Dai L., Bartal G., Zhang X. Plasmon lasers at deep subwavelength scale // Nature. 2009. V. 461. P. 629–632.
- Gadalla M.N., Chaudhary, Zgrabik Ch.M., Capasso F., Hu E.L. Imaging of surface plasmon polaritons in low-loss highly metallic titanium nitride thin films in visible and infrared regimes // Optics Express. 2020. V. 28. No.10. P. 14536–14546.
- Pendry J.B. Negative Refraction Makes a Perfect Lens // Physical Review Letters. 2000.
 V. 85. № 18. P. 3966.
- 8. Engheta N. An idea for thin subwavelength cavity resonators using metamaterials with negative permittivity and permeability // Antennas and Wireless Propagation Letters, IEEE. 2002.
 V. 1. № 1. P. 10–13.
- 9. Valitova A.F., Koryukin A.V., Gazizov A.R., Salakhov M.Kh. Improving the surface layer structure in opal-like plasmonic-photonic crystals for efficient excitation of optical Tamm states // Optical Materials. 2020. V. 110. Art. № 110404.
- 10. Koryukin A.V., Akhmadeev A.A., Gazizov A.R. Hybrid mode of optical states in opal-like plasmonic-photonic crystals // Plasmonics. 2019. V. 14. Is. 4. P. 961–966.
- Kaliteevski M., Iorsh I., Brand S., Abram R.A., Chamberlain J.M., Kavokin A.V., Shelykh I.A. Tamm plasmon-polaritons: Possible electromagnetic states at the interface of a metal and a dielectric Bragg mirror // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. No. 16. P. 165415.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ ПРОВОДЯЩИХ НИТРИДА И ОКСИНИТРИДОВ ЦИРКОНИЯ

А.Р. Газизов, С.С. Харинцев, М.Х. Салахов

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики Казань, 420008, ул. Кремлевская 16 Академия наук Республики Татарстан, Институт прикладных исследований Казань, 420111, ул. Баумана 20 e-mail: AlmaRGazizov@kpfu.ru

1. Введение

Для интеграции фотонных устройств на кремневой микросхеме необходимы материалы, совместимые с комплиментарными металл-оксид-полупроводник (КМОП) структурами, обладающие инертностью к окислению и не деградирующие при большом выделении тепла [1,2]. Особую важность в связи с этим приобретают нелинейно-оптические материалы с настраиваемыми диэлектрическими свойствами. В предыдущее десятилетие было показано, что нелинейно-оптические свойства материалов значительно усиливаются в областях частот вблизи точек нулевой диэлектрической проницаемости [1].

Одними из материалов, обладающих настраиваемыми оптическими свойствами, являются нитриды переходных элементов IV группы – Ті, Zr, Hf. Кристаллическая решетка проводящих нитридов переходных металлов имеет кубическую сингонию. Помимо КМОПсовместимости они демонстрируют оптическую нелинейность, являются тугоплавкими, а также являются плазмонными с точкой нулевой диэлектрической проницаемости ω_{cross} в видимой области спектра. Настраивание плазмонных свойств материала происходит при синтезе материала [1,2]. В частности, при магнетронном напылении нитрида титана TiN образуется пленка, преимущественная стехиометрия которого зависит от парциальных давлений азота и аргона. Также при данном методе синтеза в кристаллическую структуру нитрида металла неизбежно проникает кислород, который при больших температурах связывается с атомами переходного металла.

В настоящее время нитрид титана TiN является хорошо изученным материалом [1-4]. Существенным его недостатком в отношении нелинейной оптики и плазмоники являются большие диэлектрические потери. В приближении Друде диэлектрическая проницаемость материала записывается в виде:

$$\varepsilon = \varepsilon_{ib}(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\gamma\omega},\tag{1}$$

где $\varepsilon_{ib}(\omega)$ учитывает вклад от межзонных переходов, γ – частота столкновений электронов с решеткой, а плазмонная частота $\omega_p = \sqrt{ne^2/(m\varepsilon_0)}$ в этом приближении зависит от концентрации *n* и эффективной массы *m* электронов. Альтернативными плазмонными материалами являются ZrN и HfN. Нитрид гафния HfN обладает меньшей твердостью, чем TiN при комнатной температуре, но сохраняет свою твердость при повышенных температурах и является более тугоплавким по сравнению с TiN и ZrN [4]. Эффективные массы электрона в HfN и в ZrN примерно одинаковы, и обе заметно меньше эффективной массы электрона в TiN [5]. Среди трех рассматриваемых нитридов HfN обладает наибольшей плазменной частотой около 8-9 эВ [2, 5]. Но точка, в которой $\varepsilon_r(\omega)$ фактически равна нулю, смещена в сторону более низкой энергии (3,8 эВ) из-за межзонных переходов. Это поведение, также наблюдаемое для TiN(2.6 эВ) и ZrN(3.5 эВ), очень похоже на поведение благородных металлов [11]. По сравнению с TiN и ZrN экранированная плазмонная частота у HfN имеет наибольшее значение, что близко к частоте нулевой диэлектрической проницаемости у серебра (3.9 эВ). Однако при этом HfN демонстрирует больший уровень оптических потерь, чем ZrN из-за большей частоты столкновений γ [2,4,5]. В свою очередь, среди различных проводящих нитридов ZrN имеет несколько отличительных особенностей [3]:

1) бо́льшая постоянная решетки (~4.7 A), что делает возможным гетероэпитаксию ZrN на Si, уникальную особенность среди нитридов переходных металлов, которые обычно выращиваются эпитаксиально на MgO, а в некоторых случаях и на сапфире,

2) уменьшенные диэлектрические потери в видимой и ближней инфракрасной области спектра по сравнению с TiN, при сохранении почти такой же плотности электронов проводимости [3], что приводит к более сильному и смещенному в синюю область плазмонному отклику по сравнению с TiN и Au.

3) работа выхода, совместимая с электронным сродством полупроводников $In_xGa_{1-x}N$ с высоким содержанием Ga и $In_xGa_{1-x}As$, а также богатых индием полупроводников $In_xGa_{1-x}P$ [6].

4) способность образовывать проводящие тройные соединения путем замещений либо в металлической подрешетке, обеспечивающей спектральную перестраиваемость [4,7], либо в подрешетке лиганда (например, ZrC_xN_{1-x}), а также полупроводниковых/диэлектрических тройных соединений ZrO_xN_y.

5) стойкость к окислению сравнима или превосходит TiN [8].

ZrN обычно содержит больше внутренних напряжений и структурных дефектов, чем TiN, выращенный в аналогичных условиях, в основном по причинам кинетики роста [9]. В отличие от TtN низкий коэффициент диффузии атомов Zr в большинстве случаев приводит к образованию волокнистых пленок [10], возможно, из-за эффектов радиационного повреждения во время роста при напылении. По вышеупомянутым причинам, гетероэпитаксию ZrN на Si трудно осуществить. Следовательно, на Si могут существовать только локальные эпитаксиальные домены [11], либо в пленках присутствует высокая плотность структурных дефектов, таких как дислокации [12]. Обратной стороной того, что нитрид циркония ZrN обладает меньшими диэлектрическими потерями в видимой области, является смещение плазмонного резонанса в коротковолновую область спектра [2,3].

Целью данной работы является теоретическое исследование влияния окисления нитрида циркония на его оптоплазмонные свойства.

2. Квантовохимическое моделирование структуры ZrN

Квантовохимическое моделирование структуры ZrN типа поваренной соли мы проводили по теории функционала плотности. Атомы азота и циркония образуют подрешетки кубической сингонии гранецентрированного типа решетки. Элементарная ячейка Браве представляет ромбический параллелепипед (ромбоэдр) с равными образующими *a* = *b* = *c* и

равными углами при вершине $\alpha = \beta = \gamma = 60^{\circ}$, содержащая атом Zr и атом N. При моделировании оксинитрида была выбрана сверхъячейка, состоящая из 8 элементарных ячеек по 2 в каждом направлении основных векторов трансляции – всего 16 атомов в сверхъячейке. Структура изображена на рис.1. Атомы кислорода последовательно размещаются вместо атомов азота. Всего существуют 1 неэквивалентная конфигурация при одном атоме кислорода, 2 конфигурации при двукратном и трехкратном замещении и 4 неэквивалентные конфигурации при размещении 4 атомов кислорода в узлах вместо атомов азота. Эквивалентность в данном случае определяется относительно трансляционной симметрии и точечной группы симметрии сверхъячейки (D_{3d}).



Рис. 1. Сверхъячейка 2×2×2 нитрида циркония ZrN

Расчеты структуры производились в обобщенно-градиентном приближении с использованием обменно-корреляционного функционала Пердью-Бурке-Эрнцерхофа [13] в базисе плоских волн. Плоские волны составляли сетку Монхорста-Пака [14] в обратном пространстве решетки с числом узлов $15 \times 15 \times 15$ в первой зоне Бриллюэна. Внутренние оболочки атомов моделировались с помощью сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербильта [15] с нелинейной коррекцией остова [16]. При решении самосогласованной задачи кинетическая энергия для волновых функций была ограничена значением 90 Ry, а плотность заряда – значением 360 Ry. После геометрической оптимизации с помощью алгоритма Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно (BFGS) и решении самосогласованной задачи был проведен расчет полной электронной плотности и вклада от проекций орбиталей каждого атома. При каждом вычислении использовались критерий электронной сходимости 10^{-12} и сходимость по энергии и силам при геометрической оптимизации 10^{-10} . Все расчеты проводились по методу, реализованному в программном пакете Quantum Espresso v.6.7 [17] на вычислительном кластере Казанского федерального университета.

3. Обсуждение результатов

После геометрической оптимизации структуры нитрида циркония постоянная решетки получилась равной 4.6 А. Для каждой рассчитанной структуры оксинитрида циркония с различным числом атомов кислорода в ячейке были получены плотности состояний и ее проекции на атомные орбитали.



Рис. 2. Плотность электронных состояний нитрида (слева) и оксинитрида циркония (справа) с различным содержанием кислорода. Энергия Ферми обозначена вертикальной линией

На рис. 2 построены полные плотности электронных состояний для нескольких структур, состоящие из двух основных зон (нижней и верхней) вблизи уровня Ферми E_F. Плотность состояний чистого нитрида циркония отмечена штриховкой под кривой. Нижняя неметаллическими 2р-орбиталями, полоса образована гибридизированными с металлическими p-орбиталями Zr и d-орбиталями Zr [2,3]. Основной вклад в верхнюю полосу дает полузаполненная d-орбиталь металлического циркония и слегка смещается вниз при замене N на O. Другая картина имеет место для нижней полосы. При увеличении концентрации кислорода О положение 2р-орбитали относительно уровня Ферми *E*_F смещается вниз примерно на 2 3B, и, таким образом, для межзонных переходов $2p \rightarrow 4d$ требуется более высокая энергия. Следует отметить, что s-орбитали неметаллических элементов претерпевают небольшой сдвиг в синюю сторону на 0,5 эВ. Это означает, что оптические потери в видимой области из-за переходов (О или N) 2p → 4d в оксинитриде циркония существенно уменьшаются.

С другой стороны, замещение трехвалентного азота N двухвалентным кислородом O приводит к появлению дополнительных свободных электронов в расчете на каждую ячейку. В свою очередь, это приводит к увеличению энергии Ферми E_F , или что равносильно этому – смещению зоны 4d-орбиталей циркония. Увеличение числа свободных электронов приводит увеличению плазмонной частоты ω_p . Более того, на рис. 2 можно заметить, что определенные кислородные конфигурации приводят к возникновению локальных максимумов плотности электронных состояний вблизи 1.5 эВ ниже уровня Ферми E_F . Это приводит к небольшому дополнительному вкладу от межзонных переходов в красной области, что означает увеличение диэлектрической проницаемости. Эта особенность отсутствует у оксинитрида титана [1-3].

4. Заключение

В данной работе выполнено *ab initio* моделирование плотности состояний нитрида и оксинитридов циркония. Несмотря на то, что нитрид циркония обладает хорошей стойкостью к оксислению, при синтезе все равно образуются оксинитриды с различной стехиометрией. В модели сверхъячейки с дефектами, данным стехиометриям соответствуют конфигурации с эквивалентным расположением атомов кислорода согласно группе симметрии ячейки. Были

рассмотрены конфигурации с 1,2,3 и 4 атомами кислорода. Показано, что рост концентрации кислорода приводит к появлению дополнительной зоны около 7 эВ ниже уровня Ферми. Также из-за увеличения концентрации электронов в оксинитриде по сравнению с нитридом циркония плазменная частота оксинитрида смещается в синюю область. Полученные результаты проливают свет на электронные свойства тройных оксинитридов циркония ZrN_xO_y и позволяют далее углубиться в квантовую плазмонику этих материалов. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант №21-72-00052).

- 1. Kharintsev S.S., Kharitonov A.V., Gazizov A.R., Kazarian S.G. Disordered nonlinear metalens for Raman spectral nanoimaging // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2020. V. 12. № 3. P. 3862–3872.
- 2. Kumar M., Umezawa N., Ishii S., Nagao T. Examining the performance of refractory conductive ceramics as plasmonic materials: A theoretical approach // ACS Photonics. 2016. V. 3. P. 43–50.
- Patsalas P. Zirconium nitride: A viable candidate for photonics and plasmonics? // Thin Solid Films. 2019. V. 688. P. 137438.
- 4. Patsalas P., *et al.* Conductive nitrides: Growth principles, optical and electronic properties, and their perspectives in photonics and plasmonics // Mater. Sci. Eng. R. 2018. V. 123. P. 1–55.
- 5. Strømme M., Karmhag R., Ribbing C.G. Optical constants of sputtered hafnium nitride films. Intra- and interband contributions // Opt. Mater. 1995. V. 4. P. 629–639.
- 6. Matenoglou G.M., Koutsokeras L.E., Patsalas P. Plasma energy and work function of conducting transition metal nitrides for electronic applications // *Appl. Phys. Lett.* 2009. V. 94. P. 152108.
- 7. Kassavetis S., Bellas D.V., Abadias G., Lidorikis E., Patsalas P. Plasmonic spectral tunability of conductive ternary nitrides // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 108. P. 263110.
- 8. Abadias G., Koutsokeras L.E., Siozios A., Patsalas P. Stress, phase stability and oxidation resistance of ternary Ti–Me–N (Me=Zr,Ta) hard coatings // Thin Solid Films. 2013. V. 538. P. 56–70.
- Koutsokeras L.E., Abadias G. Intrinsic stress in ZrN thin films: Evaluation of grain boundary contribution from in situ wafer curvature and ex situ x-ray diffraction techniques // J. Appl. Phys. 2012. V. 111. P. 093509.
- Abadias G. Stress and Preferred Orientation in Nitride-Based PVD Coatings // Surf. Coat. Technol. 2008. V. 202. P. 2223–2235.
- Barnett S.A., Hultman L., Sundgren J.-E. Epitaxial growth of ZrN on Si(100) // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 53. P. 400–402.
- 12. Yanagisawa H., et al. Epitaxial growth of (111)ZrN thin films on (111)Si substrate by reactive sputtering and their surface morphologies // J. Cryst. Growth. 2006. V. 297. P. 80–86.
- Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof. M. Generalized gradient approximation made simple // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. № 18. P. 3865–3868.
- Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations // Phys. Rev. B. 1976.
 V. 13. № 12. P. 5188–5192.
- Hamann D.R. Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials // Phys. Rev. B. 2013.
 V. 88. P. 085117.

- 16. Van Setten M.J., et al. The PseudoDojo: Training and grading a 85 element optimized normconserving pseudopotential table // Comput. Phys. Commun. 2018. V. 226. P. 39–54.
- 17. Giannozzi P., et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO// J. Phys.: Condens. Matter. 2017. V. 29. P. 465901.

КВАНТОВО-ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ И УПРАВЛЕНИЕ ЭНЕРГИЕЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ

Р.Х. Гайнутдинов^{1,2,*}, А.И. Гарифуллин¹, М.А. Хамадеев^{1,2}

¹Казанский федеральный университет, 420008, Казань, ул. Кремлевская, 18 ²Академия наук Республики Татарстан, 420111, Казань, ул. Баумана, 20 e-mail: adel-garifullin@mail.ru

1. Введение

Такие искусственные материалы как фотонные кристаллы (ФК) являются перспективной средой для создания различных устройств фотоники [1] и для изучения квантово-электродинамических эффектов как управление спонтанным излучением квантовых излучателей, помещенных в периодическую структуру ФК [2], усиление эффектов квантовой интерференции, создание темных состояний [3], управление массой электрона [4] и др. В работе [4] был предсказан эффект, заключающийся в том, что сильная модификация электромагнитного поля в ФК приводит к значительному изменению взаимодействия электрона с собственным полем излучения, что выражается в существенном изменении электромагнитной массы заряженной частицы. Электромагнитная масса не измерима в эксперименте в связи с ультрафиолетовой расходимостью [5]. Рассматриваемая модификация электромагнитного взаимодействия в среде ФК приводит к поправке δm_{pc} электромагнитной массы m_{em} . Важно отметить, что собственно-энергетическая поправка δm_{pc} является конечной и анизотропной величиной, зависящей от направления импульса электрона в ФК. Величина собственно-энергетической поправки приводит к значительному сдвигу уровней энергии атомов, помещенных в полость периодической структуры, сопоставимому по величине с обычными атомными переходами.

Следствием этого эффекта является возможность управления энергией ионизации атомов в периодической среде ФК, а также частотами фотонов, излучаемых квантовыми точками (КТ). Целью данной работы является развитие методов управления энергией ионизации, следовательно, управления физико-химическими свойствами атомов, помещенных в полости одномерных ФК на основе сред с высоким показателем преломления, а также управления частотами фотонов, излучаемых КТ. В качестве таких материалов мы использовали метаматериал, состоящий из золотых наночастиц в диэлектрической матрице на основе HfO₂ [6, 7].

2. Результаты и обсуждение

Эффект изменения электромагнитной массы электрона связан с модификацией взаимодействия заряженной частицы с собственным облаком виртуальных фотонов, что проявляется в сдвиге энергетических уровней изолированного атома, помещенного в вакуумную полость ФК [4]. Наблюдаемой поправки соответствует оператор, зависящий от импульса электрона **p**:

$$\delta m_{pc} \left(\hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}} \right) = \Delta m_{em}^{pc} \left(\hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}} \right) - \Delta m_{em} =$$

$$= \frac{\alpha}{\pi^{2}} \left[\sum_{n} \int_{FBZ} \frac{d^{3} \mathbf{k}}{\omega_{\mathbf{k}n}^{2}} \sum_{\mathbf{G}} \left| \hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{E}_{\mathbf{k}n}(\mathbf{G}) \right|^{2} - \int \frac{d^{3} \mathbf{k}}{2\mathbf{k}^{2}} \sum_{\lambda=1}^{2} \left| \hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}} \cdot \varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) \right|^{2} \right]^{2}$$
(1)

где I_p – оператор направления импульса электрона, α – постоянная тонкой структуры, $\omega_{kn}(\mathbf{k})$ – дисперсионные соотношения, определяющие связь энергии фотона с его импульсом в рассматриваемой среде, $\mathbf{E}_{kn}(\mathbf{G})$ – вектор электрической компоненты блоховского фотона, $\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})$ – единичный вектор поляризации электрического поля в вакууме, суммирование в ряд по плоским волнам выполняется по семейству векторов обратной решетки $\mathbf{G} = N_1 \mathbf{b}_1 + N_2 \mathbf{b}_2 + N_3 \mathbf{b}_3$, интегрирование в обратном пространстве осуществляется в первой зоне Бриллюэна (FBZ) [8].



Рис. 1. Функции дисперсии $n_{eff}(\omega)$ для метаматериала, состоящего из ансамбля наночастиц золота (AuNPs), покрытого HfO₂ (толстая сплошная оранжевая и голубая линии). Зависимости получены из

экспериментальной кривой ($n_d(\omega) \approx \sqrt{\varepsilon_d(\omega)}$ для HfO₂) (красная штриховая кривая) [7] с использованием модели эффективной среды, при которой $n_{eff}(\omega) = [(a / g)\varepsilon_d(\omega)]^{1/2}$ [6], a = 30 нм, g = 0,7 нм (толстая сплошная оранжевая линия) и a = 30 нм, g = 0,5 нм (толстая сплошная голубая линия). Оставшиеся части кривых были продолжены таким образом, что при высоких энергиях фотонов $n_{eff} \rightarrow 1$ (коричневая пунктирная и зеленая штрих-пунктирная линии). Средние значения показателя преломления (a) $n_{eff} = 15$ и (б) $n_{eff} = 18$ даны для первой и второй спектральных линий при максимальной частоте фотонов $\omega_{kn}^{max} = 10,65$ эВ

Рассмотрим процесс ионизации, определяемый переходом внешнего, валентного электрона, атома водорода и щелочных металлов, помещенных в полости одномерного ФК. Нижнее состояние является основным состоянием атома (*S*-состояние), верхнее состояние является свободным состоянием. Разница между энергиями этих состояний определяет энергию связи электрона. В случае среды ФК энергия связи зависит от направления импульса свободного электрона **р**, при этом данная энергия влияет на конфигурации связей в молекулах. Однако первоначально среда ФК влияет на энергию ионизации атомов, которая определяется как минимальная энергия, необходимая для отрыва электрона из атома и его перемещения на бесконечность. Тогда поправка к энергии ионизации принимает вид:

$$\delta E_{ion}^{pc} = \delta m_{pc}^{min} - \delta m_{pc}^{l,m}, \qquad (2)$$

где δm_{pc}^{min} – минимальная поправка к массе свободного электрона, определяемая выражением (1), $\delta m_{pc}^{l,m} = \langle \Psi | \delta m_{pc} (\hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}}) | \Psi \rangle = \langle l, m_l | \delta m_{pc} (\hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}}) | l, m_l \rangle$. Для случая атома водорода, щелочных и щелочноземельных металлов $l = 0, m_l = 0$. Таким образом, поправка к энергии ионизации может быть представлена в виде [9]:

$$\delta E_{ion}^{pc} = -\frac{2\alpha}{3\pi} \sum_{n,G} \left[\int k_{\rho} dk_{\rho} \int_{FBZ} dk_{z} \left(\frac{\left| E_{\mathbf{k}n1} \left(G \right) \right|^{2}}{\omega_{\mathbf{k}n1}^{2}} \cdot \frac{k_{Gz}^{2} - 2k_{\rho}^{2}}{k_{\rho}^{2} + k_{Gz}^{2}} + \frac{\left| E_{\mathbf{k}n2} \left(G \right) \right|^{2}}{\omega_{\mathbf{k}n2}^{2}} \right) \right], \tag{3}$$

где интегрирование в обратном пространстве выполняется в цилиндрической симметрии одномерного ФК, $E_{kn\lambda}(G)$ – поперечные компоненты электрического поля ($\lambda = 1, 2$), $k_{Gz} = k_z + G$.

Функции дисперсии оптически плотных слоев одномерного ФК – слоев метаматериала, состоящего из золотых наночастиц с диэлектрической матрицей на основе HfO₂ [6, 7], представлена на рис. 1. Рассчитанные по данным функциям поправки к энергии ионизации атомов представлены на рис. 2.



Рис. 2. Сравнение энергии ионизации атома водорода, щелочных и щелочноземельных металлов для случая вакуума (синие точки) и среды ΦК (красные квадраты и треугольники) на основе метаматериала с *a* = 30 нм, *g* = 0,7 нм (квадраты) и *a* = 30 нм, *g* = 0,5 нм (треугольники). Поправка к энергии ионизации равна $\delta E_{ion1}^{pc} = -1,82$ эВ (квадраты) и $\delta E_{ion2}^{pc} = -2,64$ эВ (треугольники)

Резкие резонансные пики в плотности фотонных состояний периодической среды ΦK также значительно влияют на взаимодействие электрона (экситона) КТ с собственным полем излучения. В работе мы построили спектры излучения одиночной КТ InAs/GaAs, помещенной на слой одномерного ΦK на основе GaAs (рис. 3). Для решения этой задачи мы рассмотрели одноэлектронную КТ в *S* - и *P* - состояниях и рассчитали разность поправок к электромагнит-

ной массе электрона КТ в данных состояниях в периодической структуре. Обычно эксперименты с КТ выполняются при низких температурах. Условия эксперимента обеспечиваются температурами от 4 до 40 К. Это связано с тем, что при больших температурах (T>40 K) взаимодействие электрона (экситона) КТ с фононами вносит существенный вклад в уширение их энергетических уровней и спектральных линий.

Мы показываем, что на основе электрооптического эффекта Керра и эффекта изменения массы электрона в ФК появляется возможность управления уровнями энергии, соответственно, спектрами излучения естественных и искусственных атомов. Это может быть важно для создания однофотонных источников света с управляемой частотой фотонов, необходимых для генерации частотных кубитов, у которых состояния кодируются в виде суперпозиции двух однофотонных состояний с разными частотами [10].



Рис. 3. Спектр излучения (лоренцевский контур) КТ InAs/GaAs, помещенной в среду одномерного ФК на основе оптически плотных слоев из GaAs. Синяя штриховая линия соответствует излучению КТ в вакууме, красная сплошная линия сдвинута относительно синей на $\Delta z_1 = 1,537$ мэВ – излучение КТ в среде одномерного ФК, фиолетовая штрих-пунктирная линия сдвинута относительно красной на $\Delta z_2 = 0,180$ мэВ – излучение искусственного атома в одномерном ФК с керровской нелинейностью ($\Delta n = 0,015$ для GaAs при облучении лазерным импульсом с длиной волны 1900 нм, длительностью 166 фс и плотностью энергии ~ 800 мкДж/см²) [11]. Параметры ФК: $d_l/T = 1/3$, max(n_h) = 3,615 и d_h/T = 2/3. Период *T* одномерного ФК составляет 750 нм. Параметры КТ InAs/GaAs: Г (скорость затухания) = 77 мкэВ, T = 4 К, энергия перехода экситона КТ $\omega_x = 830$ мэВ [12]. В задаче мы рассматриваем одноэлектронный искусственный атом

Данные кубиты интересны тем, что они имеют высокую устойчивость к флуктуациям среды окружения при их передаче по различным пространственным каналам, что важно при наличии электрон-фононного взаимодействия в КТ.

3. Выводы

В настоящей работе *впервые* исследовано влияние модификации взаимодействия электрона с собственным полем излучения в анизотропной среде одномерного ФК на основе материалов с высоким показателем преломления на величину поправки к энергии ионизации атома водорода и щелочных металлов, а также на частоты фотонов, излучаемых КТ. Использование материалов с высоким показателем преломления в ФК позволяет выходить за рамки, налагаемые периодическим законом таблицы химических элементов Менделеева на физикохимические процессы, и открывает новые горизонты в синтезе новых химических соединений, которые могут быть использованы в фармацевтике и в различных медицинских приложениях. Эффект изменения массы электрона позволяет управлять энергетическими уровнями КТ, помещенных в ФК. Изменяя показатель преломления с помощью эффекта Керра, можно управлять частотами фотонов, излучаемых КТ. Это может найти применение в создании однофотонных источников с управляемой частотой генерируемых фотонов.

- 1. Sakoda K. Optical Properties of Photonic Crystals // Springer. 2001. P. 213.
- 2. Wang W. et al. Enhanced quantum dots spontaneous emission with metamaterial perfect absorbers // Appl. Phys. Lett. 2019. V. 114. P. 021103.
- 3. Song G., Xu J., Yang Y. Quantum interference between Zeeman levels near structures made of lefthanded materials and matched zero-index metamaterials // Phys. Rev. A. 2014. V. 89. P. 053830.
- 4. Gainutdinov R.Kh., Khamadeev M.A., Salakhov M.Kh. Electron rest mass and energy levels of atoms in the photonic crystal medium // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. 053836.
- 5. Bjorken J. D., Drell S. D. Relativistic quantum mechanics // McGraw-Hill. 1965. P. 178.
- 6. Chung K. et al. Optical effective media with independent control of permittivity and permeability based on conductive particles // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 109. P. 021114.
- 7. Franta D., Nečas D., Ohlídal I. Universal dispersion model for characterization of optical thin films over a wide spectral range: application to hafnia // Appl. Opt. 2015. V. 54. P. 9108.
- Skorobogatiy M., Yang J. Fundamentals of Photonic Crystal Guiding // Cambridge Univ. Press. 2009. P. 72.
- 9. Gainutdinov R.Kh., Garifullin A.I. et al. Quantum electrodynamics in photonic crystals and controllability of ionization energy of atoms // Phys. Lett. A. 2021. V. 404. P. 127407.
- 10. Chuprina I.N., Kalachev A.A. Generating frequency-bin qubits via spontaneous four-wave mixing in a photonic molecule // Phys. Rev. A. 2019. V. 100. P. 043843.
- 11. Mondia J.P. et al. Ultrafast tuning of two-dimensional planar photonic-crystal waveguides via free-carrier injection and the optical Kerr effect // J. Opt. Soc. Am. B. 2005. V. 22. P. 2480.
- 12. Hughes S. et al. Influence of electron-acoustic phonon scattering on off-resonant cavity feeding within a strongly coupled quantum-dot cavity system // Phys. Rev. B. 2011. V. 83. P. 165313.

ВЛИЯНИЕ ВЕЙВЛЕТ-ДЕТРЕНДИРОВАНИЯ НА СТЕПЕНЬ СЛУЧАЙНОСТИ ШУМА, ГЕНЕРИРУЕМОГО КВАНТОВЫМ ГСЧ

Л.Р. Гилязов, М.Э. Сибгатуллин, Н.М. Арсланов

ФГБОУ ВО «КНИТУ-КАИ»

420111 г. Казань, ул. К. Маркса, 10 Академия наук Республики Татарстан, Институт прикладных исследований 420111, Россия, Республика Татарстан, г. Казань, Баумана, 20 e-mail: lgilyazo@gmail.com

1. Введение

В данной работе проводилось исследование свойств случайности шума, генерируемого системой гомодинного детектирования лазерного излучения, когда после разностного детектирования выходных сигналов ожидается недетерминированный квантовый шум. Изучалась зависимость степени случайности от длины выборки и влияния детрендирования с применением вейвлет-анализа. Для оценки степени случайности генерируемой последовательности чисел применялись тесты NIST.

2. Исследование случайного шума

Генераторы случайных чисел (ГСЧ) применяются в различных областях современных технологий. Одним из основных свойств ГСЧ является непредсказуемость. Это означает, что все элементы последовательности генерируются независимо друг от друга, а значение следующего элемента в последовательности не может быть предсказано, независимо от того, сколько элементов уже было создано. Однако достичь абсолютной случайности проблематично для генератора псевдослучайных чисел, в основе которого лежит математический алгоритм. По этой причине для криптографических систем применение генератора псевдослучайных чисел является недопустимым. Поскольку от детерминированных систем невозможно получить совершенно случайную последовательность, применение источников энтропии, построенных на основе схем квантовой оптики, является одним из наиболее перспективных подходов к построению генераторов последовательностей недетерминированных случайных чисся, что обеспечивается фундаментальной вероятностной природой квантовых процессов.

Традиционно квантовая генерация случайных чисел (КГСЧ) осуществляется за счет установки в оптический тракт светоделителя и последующей регистрации однофотонных импульсов детекторами фотонов в двух плечах оптической схемы. Для данных детекторов характерна лимитированная скорость счета. Связано это с применением схем компенсации послелавинных срабатываний, что ограничивает скорость генерации случайных последовательностей для систем КГСЧ, основанных на счете однофотонных сигналов. Скорость генерации в подобных системах на практике достигает порядка 20 Мбит/с, что является недостаточным для многих областей применения. Высокоскоростные устройства квантовой криптографии требуют скорость генерации истинно случайных последовательностей не менее 100 Мбит/с [1-2]. На рис.1 показан случайный квантовый шум, полученный с применением экспериментальной установки и его спектр Фурье.



Рис. 1. Экспериментальный шум и его спектр

В качестве источника излучения в схеме использовался DFB-лазер, работающий на длине волны 1550 нм и шириной полосы 1МГц, мощность излучения составляла 20мВт. Излучение поступало на вход волоконного Y-разветвителя 50/50, выход которого поступал на фотоприемники гомодинного детектора. Фотоприемник представлял собой два балансно включенных InGaAs pi-n фотодиода производства ООО «Лазерском». Данный фотодиод имеет частоту среза 2ГГц, малый темновой ток 0.03нА и емкость порядка 0.65пА. Сигнал с фотодиодов усиливался операционным усилителем Texas Instruments OPA847, включенным в режиме трансимпедансного усиления. После усилителя сигнал проходил через ФВЧ, который срезал весь шум ниже 95МГц, и еще один операционный усилитель Analog Devices AD8099 с коэффициентом усиления 20. Далее уже выходной сигнал пропускался через ФНЧ с частотой среза порядка 105МГц и поступал на 50 Ом СВЧ коннектор.

В настоящее время не существует общепринятого подхода к количественной оценке близости псевдослучайных последовательностей к истинно случайным, а также отсутствует единый критерий сравнения качества генераторов [3]. Одним из подходов оценки случайности являются статистические тесты NIST — пакет статистических тестов, разработанный Лабораторией информационных технологий, являющейся главной исследовательской организацией Национального института стандартов и технологий (NIST). В его состав входят 15 статистических тестов, целью которых является определение меры случайности двоичных последовательностей. В результате применения тестов выдается результат, является ли исследуемая последовательность случайной или нет: рассчитывается вероятность того, что исследуемая числовая последовательность является не хуже, чем гипотетически истинная последовательность. При значении более 0.01 последовательность признается случайной с уровнем доверия 99% [4].

В качестве инструмента для проведения процедуры детрендирования (удаления шума) в данной работе применялся вейвлет-анализ. Одномерное преобразование Фурье дает также одномерную информацию об относительном вкладе (амплитудах) разных временных масштабов (частот). Результатом вейвлет-преобразования одномерного ряда является двумерный массив амплитуд вейвлет-преобразования – значений коэффициентов W(a,b). Распределение этих значений в пространстве (a,b) = (временной масштаб, временная локализация) дает информацию об эволюции относительного вклада компонент разного масштаба во времени и называется спектром коэффициентов вейвлет-преобразования, масштабно-временным спектром или вейвлет-спектром. В таблице 1 приведены результаты применения тестов NIST к исследуемому шуму.

					20.000				
		I	последоват	гельность	20 000 эле	ментов			
	kn	dkn1	dkn2	dkn3	dkn4	dkn5	dkn10	dkn11	dkn12
BlockFrequency	0.33	0	0	0	0	0	0	0	0
FFT	0.04	0.03	0.09	0.36	0.27	0.89	0	0.46	0.75
LinearComplexity	0.76	0.64	0.27	0.48	0.22	0.12	0.25	0.17	0.74
LongestRun	0.05	0.03	0	0	0	0	0	0	0
Overlapping	0.14	0	0.05	0.67	0	0.03	0.82	0.13	0.73
Template									
Rank	0.53	0.35	0.11	0.07	0.23	0.34	0.51	0.07	0.20
последовательность 100 000 элементов									
	kn	dkn1	dkn2	dkn3	dkn4	dkn5	dkn10	dkn11	dkn12
BlockFrequency	0.51	0	0	0	0	0	0	0	0
FFT	0	0	0	0	0.02	0.88	0.28	0.74	0.9
LinearComplexity	0.97	0.73	0.59	0.34	0.29	0.23	0.97	0.70	0.35
LongestRun	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Overlapping	0	0.15	0	0	0	0	0	0	0
Template									
Rank	0.28	0.99	0.04	0.11	0.13	0.39	0.72	0.18	0.53
	1	пс	следовате	льность 1	ие 000 000 эл	іементов	1	1	1
	kn	dkn1	dkn2	dkn3	dkn4	dkn5	dkn10	dkn11	dkn12
BlockFrequency	0.99	0	0	0	0	0	0	0	0
FFT	0	0	0	0	0	0	0.08	0.07	0
LinearComplexity	0.68	0.17	0.81	0.30	0.52	0.18	0.18	0.14	0.94
LongestRun	0	0.03	0	0	0	0	0	0	0
Overlapping	0	0.55	0	0	0	0	0	0	0
Template									
Rank	0.44	0.78	0.23	0.03	0.27	0.03	0	0.02	0.52
		ПО	следовател	льность 10	000 000 э	лементов			1
	kn	dkn1	dkn2	dkn3	dkn4	dkn5	dkn10	dkn11	dkn12
BlockFrequency	1	0	0	0	0	0	0	0	0
FFT	0	0	0	0	0	0	0	0	0
LinearComplexity	0.59	0.24	0.21	0.20	0.79	0.76	0.76	0.59	0.9
LongestRun	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Overlapping	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Template									
Rank	0.42	0.85	0.87	0.72	0.71	0.86	0.04	0.32	0.99

Значения вероятности, характеризующей случайность ряда для исследуемой случайной последовательности. Значения менее 0,01 представлены как 0

Детрендирование выполнялось следующим образом – проводилось прямое вейвлетпреобразование шума, значения вейвлет-коэффициентов на крупных масштабах приравнивались нулю, выполнялось обратное вейвлет-преобразование [5,6]. Исходные значения шума переводились в двоичную систему счисления и представляли собой последовательность 0 и 1.

В таблице представлены значения вероятности для последовательностей различной длины (от 20 тысяч до 10 миллионов) и различных уровней детрендирования (от 1 (dkn1) до

14 (dkn12)), kn – исходная последовательность, без выполнения процедуры детрендирования. Приведены значения для 6 тестов, по остальным 9 тестам при всех вариантах расчета были получены значения вероятности менее 0.01 – исследуемый шум не проходит тест на случайность. Исследование случайного шума, полученного с применением квантового генератора случайных чисел, показало, что при малых размерах исследуемой выборки (порядка 20 тысяч элементов) нет необходимости в применении процедуры детрендирования, 6 тестов NIST показывают случайную структуру последовательности. Применение процедуры детрендирования ухудшает результат прохождения тестов – количество удачно пройденных тестов падает до четырех. При увеличении размеров выборки (порядка 1 миллиона элементов), без процедуры детрендирования, количество удачно пройденных тестов падает до трех, при применении процедуры детрендирования, количество удачно пройденных тестов достигает четырех. При значениях количества исследуемых элементов порядка десятков миллионов, количество удачно пройденных тестов сокращается до трех, процедура детрендирования сокращает количество удачно пройденных тестов до двух. Таким образом, показано, что для коротких последовательностей чисел (размер выборки порядка десятков тысяч) можно не использовать процедуру детрендирования. Однако для устройств квантовой криптографии при работе с выборками, содержащими около миллиона элементов, применение процедуры детрендирования дает возможность увеличить степень случайности генерируемого шума.

Работа выполнена в рамках госзадания - соглашение № 02.03.2020 №00075-02-2020-051/1 реестр №78 КБК 01104730290059611.

- Балыгин К.А., Зайцев В.И., Климов А.Н., Кулик С.П., Молотков С.Н. Квантовый генератор случайных чисел, основанный на пуассоновской статистике фотоотчетов, со скоростью около 100 Мбит/с // ЖЭТФ. 2018. Т. 153, вып. 6. С. 879–894.
- Miguel Herrero-Collantes Quantum random number generators // Rev. Mod. Phys. 2017.
 V. 89. 015004
- 3. Будько М. Б., Будько М. Ю., Гирик А. В., Грозов В. А. Метод оценки качества криптостойких генераторов псевдослучайных последовательностей // Вопросы кибербезопасности. 2018. №4 (28). URL: https://cyberleninka.ru/article/n/metod-otsenki-kachestvakriptostoykih-generatorov-psevdosluchaynyh-posledovatelnostey (дата обращения: 05.12.2021).
- Статистическая проверка случайности двоичных последовательностей методами NIST.
 Электрон. ресурс компании Код Безопасности, Криптография. 2014. URL: habrahabr.ru/company/securitycode/blog/237695/
- Астафьева Н.М. Вейвлет-анализ: основы теории и примеры применения // УФН. 1996.
 Т. 166, № 11. С. 1145–1170.
- 6. Daubechies L. Ten Lectures on Wavelets / New York: Academic Press, 1991. P. 464.

РАСЧЕТ МОДЕЛИ ДИФРАКЦИОННОГО ЭЛЕМЕНТА СВЯЗИ СВЕТОВОГО ПУЧКА С ВОЛНОВОДОМ ИЗ НИТРИДА КРЕМНИЯ

Л.Р. Гилязов, М.Э. Сибгатуллин, Н.М. Арсланов

ФГБОУ ВО «КНИТУ-КАИ»

420111 г. Казань, ул. К. Маркса, 10 Академия наук Республики Татарстан, Институт прикладных исследований 420111, Россия, Республика Татарстан, г. Казань, Баумана, 20 e-mail: lgilyazo@gmail.com

1. Введение

В последние десятилетия происходит интеграция электронных систем с фотонными устройствами. что определяет такое новое направление как радиофотоника.

Основой компонентной базы интегральной радиофотоники являются оптические микроволноводы, представляющие собой диэлектрическую полосковую структуру прямоугольного сечения. Эффективный ввод и вывод оптического излучения в такие микроволноводы представляет собой одну из важнейших задач интегральной оптики. Простой ввод излучения путем фокусировки светового пучка на торец волновода требует очень высокой точности и наличия открытого торца волновода, что бывает не всегда доступно. Чтобы в волноводе (см.рис.1) с показателем преломления n₂ в направлении оси Z возбудить моду порядка m внешним полем с длиной волны ($k_0=2\pi/\lambda$), падающим в среде с показателем преломления n₁ под углом θ_m , должно выполняться условие согласования $k_0n_1\sin\theta_m=k_{mz}$ волновых чисел внешнего поля $k_0n_1\sin\theta_m$ и моды волновода $k_{mz}=k_0n_{eff}$, где n_{eff} - некоторый эффективный показатель преломления, учитывающий геометрические и физические параметры волновода и моды. Однако для волноводных мод должно выполняться условие sin $\theta_m>1$, что в свою очередь невозможно.



Рис. 1. 2D-схема возбуждения моды волноводной структуры. Внешнее поле падает под углом θ в среде с показателем преломления n₁. n₂, n₃- показатель преломления волноводного слоя и подложки

Следовательно, возбудить волноводные моды путем облучения волновода через одну из его плоских поверхностей невозможно, для ввода-вывода излучения через поверхность волновода требуются специальные элементы. Одним из таких элементов, позволяющих вводить излучение в волноводную структуру, является дифракционная решетка. Эффективность возбуждения волноводных мод через дифракционные решетки сильно зависит от параметров таких решеток и физических свойств сред и электромагнитного поля.

2. Моделирование

Волноводные системы в основном изготавливаются на основе нитрида кремния, поскольку нитрид кремния обладает низкими оптическими потерями [1, 2]. В данной работе был смоделирован прямоугольный полосковый волновод из нитрида кремния Si_3N_4 с решеточным элементом ввода-вывода излучения, имеющий прямоугольную симметричную структуру, осажденную на подложку из оксида кремния SiO_2 . На рис. 2 представлена 2D-схема исследуемого волноводнорешетчатого элемента связи с бинарной решеткой на тонкой подложке. Показатели преломления Si_3N_4 , SiO2 и Si составляют 1.46, 2.02 и 3.46 соответственно. Моделирование дифракционной решетки для 2D случая проводилось в пакете COMSOL Multiphysics при помощи модуля Wave Optics Module. Все расчеты велись для длины волны излучения 1550 нм и для TE-поляризации.



Рис. 2. Схематичное представление волноводно-решеточной структуры

Толщина волноводного слоя, на который был нанесен решетчатый элемент связи, составлял 500 нм. Для определения периода решетки и оптимального угла падения излучения на решетку, при котором наблюдается максимальная эффективность решетки, был проведен численный расчет волноводно-решеточной структуры (рис. 3а). Период решетки влияет на характеристики решетки через следующее уравнение:

$$d = \lambda / n_{eff} - n_c^* \sin\theta$$
,

где d - период решетки, λ - длина волны излучения, n_{eff} - эффективный показатель преломления решетки, n_c - эффективный показатель преломления для падающего на решетку излучения и θ - угол падения излучения на решетку. На рис. За по оси абсцисс показан угол падения излучения на решетку, а по оси ординат - период решетки. Из расчетов, показанных на рис. 3, видно, что оптимальный угол падения излучения составляет 28 градусов при периоде решетки, равном 1300 нм.

Толщина подстилающего под волноводом слоя является важным фактором, который влияет на вносимые потери волноводно-решеточной структуры. Минимальные вносимые потери могут быть достигнуты, когда отражения от верхней и нижней границы подстилающего слоя приводят к деструктивной интерференции.



Рис. 3. а) Зависимость дифракционной эффективности решетки высотой 250 нм для вводимого излучения в волновод от угла падения и периода решетки. b) Зависимость эффективности ввода излучения от периода решетки и высоты подстилающего слоя оксида кремния, на котором лежит волноводная структура

Результаты моделирования зависимости эффективности ввода излучения от толщины подстилающего слоя оксида кремния, на котором лежит волноводная структура, представлена на рис. 3b. Толщина подстилающего слоя варьировалась в диапазоне от 1100 до 1500 нм.

Из расчетов, показанных на рис. 3b, можно сделать вывод о том, что в области просчитанных толщин существует четыре оптимальных толщины – 900 нм, 1400 нм, 2000 нм и 2600 нм. Наиболее оптимальной толщиной является 2000 нм, поскольку при отклонениях толщины в пределах 1900 - 2100 нм, период решетки имеет наиболее допустимые отклонения.

Глубина травления решетчатого элемента связи также влияет на характеристики волноводно-решеточной структуры, поскольку от глубины травления будет зависеть эффективный показатель преломления, а, следовательно, и характеристики самой структуры:

$$n_{\rm eff} = n_{\rm c} * \sin\theta + \lambda/d$$

По мере увеличения глубины травления эффективный показатель преломления протравленной области уменьшается, что приводит к уменьшению n_{eff} всей структуры. На рис. 5 показан результат моделирования, как влияет глубина травления на эффективность ввода излучения. Из результатов моделирования, показанных на рис. 5, видно, что оптимальная глубина травления решетки, при которой наблюдается максимальная эффективность ввода излучения, составляет 250 нм.



Рис. 5. Зависимость эффективности ввода излучения от высоты и периода волноводно-решеточной структуры



Рис. 6. Распределение напряженности электрического поля Z компоненты в волноводно-решетчатой структуре для волновода толщиной 500 нм

Таким образом, для волновода толщиной 500 нм получены оптимальные параметры волноводно-решетчатого элемента связи для максимальной эффективности ввода излучения (рис. 6). Период такой решетки 1300 нм, высота 250 нм. В результате эффективность связи составила 30% (-5,22 дБ) от полной световой мощности, падающей на решетку излучения, что достаточно для большинства исследовательских целей. Отметим, что основные потери излучения происходят на отражении от решетки и на прохождении через волноводный слой. Последующее отражение такого излучения обратно в волноводную структуру может увеличить эффективность переноса излучения. Такая локализация излучения может быть реализована, например, при помощи брэгговского отражателя в подстилающем слое волноводно-решетчатой структуры. Предварительные результаты показывают значительный рост эффективности, а более детальные расчеты будут представлены в следующей работе.

Работа выполнена в рамках госзадания - соглашение № 02.03.2020 №00075-02-2020-051/1 реестр №78 КБК 01104730290059611.

- Jacob S. Levy, Alexander Gondarenko, Mark A. Foster, Amy C. Turner-Foster, Alexander L. Gaeta & Michal Lipson CMOS-compatible multiple-wavelength oscillator for on-chip optical interconnects // Nature Photonics. 2010. V. 4. № 1. P. 37–40.
- K.A. Ooi, D.T. Ng, T. Wang, A.L. Chee, S. Ng, Q. Wang, L.K. Ang, A.M. Agarwal, L.C. Kimerling & D.T.H. Tan Pushing the limits of CMOS optical parametric amplifiers with USRN:Si7N3 above the two-photon absorption edge // Nature Communications. 2017. V. 8. P. 13878.

ФОРМИРОВАНИЕ ПЛЕКСИТОННЫХ НАНОСТРУКТУР ЗА СЧЕТ ДЕКОРИРОВАНИЯ ИНТЕРФЕЙСОВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag₂S/SiO₂ ПЛАЗМОННЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ Au

И.Г. Гревцева^{1,*}, О.В. Овчинников¹, М.С. Смирнов¹, С.А. Тихомиров², А.Н. Понявина², Нгуен Тхань Бинь³, Нгуен Дай Хунг³

¹Воронежский государственный университет, 394018 Воронеж, Россия ²Институт физики им. Б.И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, 220072 Минск, Республика Беларусь ³Институт физики Вьетнамской академии наук и технологий, Напоі, Vietnam *E-mail: grevtseva_ig@inbox.ru

1. Введение

Создание на основе коллоидных квантовых точек (КТ) плазмон-экситонных (плекситонных) наноструктур открывает принципиально новые возможности для управления фотопроцессами в КТ, обеспечивающих контроль параметров люминесценции КТ (квантовый выход, время жизни, мерцание одиночных КТ и др.) [1,2]. Практическое применение плекситонных эффектов в современных приложениях нанофотоники требует детального понимания условий их проявления в люминесценции ансамблей КТ.

Условия проявления плекситонных эффектов (пространственное расстояние между компонентами, близость спектральных резонансов и т.д.) преимущественно рассмотрены для случая КТ с экситонным механизмом люминесценции, обладающих значительным структурным совершенством [1,2]. Однако стоит отметить, что полупроводниковые КТ не являются химически инертным материалом и влияние поверхностного окружения может вызывать формирование локализованных состояний (ловушек носителей заряда), которые оказывают значительное влияние на люминесцентные свойства КТ. При этом исследования в области плазмон-экситонных взаимодействий с участием локализованных состояний структурно-примесных дефектов коллоидных КТ до сих пор не выполнялись. Для КТ, обладающих рекомбинационной люминесценцией, эта проблема также остается открытой. В свою очередь, рекомбинационный характер свечения, а также дефектная структура интерфейсов КТ в ближнем поле плазмонных наночастиц (НЧ) будут существенным образом определять особенности проявления эффектов плазмон-экситонного взаимодействия.

Направленное формирование многослойных плекситонных наноструктур за счет инкапсуляции КТ в оболочку из аморфного SiO₂ с последующим химическим нанесением металлических наночастиц/нанооболочки (nanoshell) обеспечивает непосредственное взаимодействие компонентов плекситонной структуры. При этом вариация толщины слоя SiO₂ позволяет регулировать режим связи плекситонного взаимодействия, обеспечивая при этом высокую эффективность излучения и фотохимическую стабильность КТ [3,4].

В данной работе представлены результаты, демонстрирующие неспецифическое влияние плазмон-экситонного взаимодействия на квантовый выход и время жизни рекомбинационной люминесценции ансамблей коллоидных КТ Ag₂S/SiO₂, поверхность которых декорирована малыми сферическими НЧ Au.

2. Материалы и методы исследования

В данной работе реализовано направленное формирование плекситонных наноструктур путем контролируемого покрытия КТ Ag₂S диоксидом кремния (SiO₂) с последующим декорированием внешней оболочки SiO₂ сферическими наночастицами золота (НЧ Au).

Коллоидные КТ Ag₂S/SiO₂ средним размером 5.0 ± 0.5 нм синтезировали в рамках двухкомпонентной методики синтеза, где в качестве источника ионов серебра выступал водный раствор AgNO₃, а в качестве источника серы Na₂S. В качестве прекурсора SiO₂ был использован кремнеземный лиганд (3-меркаптопропил)триметоксисилан (MPTMS). Плазмонные HЧ Au средним размером 2.0 ± 0.5 нм получали путем реакции восстановления HЧAuCl₄ органическим восстановителем NaBH₄ в присутствии поверхностно активного вещества цетилтриметиламмония бромид (ЦТАБ). Декорирование поверхности КТ Ag₂S/SiO₂ плазмонными HЧ Au осуществляли за счет дополнительной функционализации поверхности КТ Ag₂S/SiO₂ аминогруппами (3-аминопропил)триметоксисилана (APTMS). Для формирования гибридных структур коллоидные растворы core/chell КТ Ag₂S/SiO₂ и НЧ Au смешивали в концентрационном соотношении [n(HЧ)]:[n(KT)] ~ 6·10¹⁶:10¹⁶.

Размер КТ Ag₂S/SiO₂, НЧ Au и плекситонных структур на их основе устанавливали с помощью просвечивающего электронного микроскопа (TEM) Libra 120 (Carl Zeiss, Germany), а также TEM изображений высокого разрешения (HR TEM) - JEOL 2000FX (JEOL Ltd., Japan). Спектроскопическое обоснование формирования плекситонных наноструктур при декорировании интерфейсов КТ Ag₂S/SiO₂ плазмонными НЧ Au осуществляли методом ИК спектроскопии с использованием ИК-Фурье спектрометра Tensor-37 (Bruker, Germany). Спектры люминесценции и кинетику затухания люминесценции КТ Ag₂S/SiO₂ и плекситонных структур на их основе исследовали с помощью спектрофотометра USB2000+ и платы время-коррелированного однофотонного счёта TimeHarp 260 Pico (PicoQuant, Germany) с модулем ФЭУ РМС-100-20 (Becker&Hickl, Germany) с временным разрешением, составляющим 0.2 нс. Для возбуждения люминесценции использовали лазерный диод LD PLTB450 (Osram, Germany) с излучением на длине волны 532 нм (200 мВт). Измерения проводили при температуре 300 и 77 К.

3. Результаты и обсуждение

Формирование КТ Ag2S/SiO2 средним размером 5.0 ± 0.5 нм было подтверждено путем сопоставления темнопольных и светлопольных ТЕМ изображений от КТ Ag₂S/SiO₂. Расхождения в размерах КТ на темнопольном (1.8 ± 0.5 нм) и светлопольном (5.0 ± 0.5 нм) снимках отнесены к формированию оболочки SiO₂ (рис. 1 (a, a')). Анализ НК ТЕМ изображений показал формирование агломератов частиц с межплоскостными расстояниями ~ 0.222 нм, соответствующими кристаллографической плоскости (130) моноклинной решетки Ag₂S, и частиц с межплоскостными расстояниями λ g₂S, и частиц с межплоскостными расстояниями 0.2039 нм, соответствующими кристаллографической плоскости (200) кубической гранецентрированной решетки Au (рис. 1 (b)), что подтверждает формирование НЧ Au вблизи функционализированной аминогруппами поверхности КТ Ag₂S/SiO₂.

Анализ ИК спектров поглощения продемонстрировал изменение структуры интерфейсов КТ Ag₂S/SiO₂ на всех этапах формирования плекситонных наноструктур. При формировании КТ Ag_2S/SiO_2 в ИК спектре возникают максимумы с частотами, соответствующими колебаниям силоксановых (1103 см⁻¹ (vas(Si-O-Si)), 1023 см⁻¹ (vs(Si-O-Si) и 800 см⁻¹ δ (Si-O-Si)) и силанольных групп 3260 см⁻¹ (v(SiOH)) и 928 см⁻¹ (δ (SiOH)), что подтверждает наличие оболочки SiO₂ на интерфейсах КТ (рис. 1 (с)).



Рис. 1. Светлопольное (**a**) и темнопольное (**a**') ТЕМ изображения КТ Ag_2S/SiO_2 . HR TEM изображения КТ $Ag_2S/SiO_2/Au$ (**b**). ИК спектр поглощения КТ Ag_2S/SiO_2 и КТ $Ag_2S/SiO_2/Au$ (**c**)

В результате функционализации поверхности КТ Ag₂S/SiO₂ аминогруппами в ИК спектрах проявляются характеристичные колебания групп NH₄⁺ (3140 см⁻¹ и 3049 см⁻¹ v(NH₄⁺), 1485 см⁻¹, 1450 см⁻¹ и 1408 см⁻¹ $\delta as(NH_4^+)$) и NH₂ (3401 см⁻¹ и 3233 см⁻¹ v(NH), 1658 δ (NH)). Направленное декорирование интерфейсов КТ Ag₂S/SiO₂ плазмонными НЧ Au осуществляется за счет взаимодействия аминогрупп с металлом. В зависимости от знака заряда аминогрупп на поверхности КТ Ag₂S/SiO₂ возможны две схемы взаимодействия с металлической НЧ. В случае отрицательно заряженной поверхности имеет место координационное взаимодействие металла с аминогруппами, для положительно заряженной поверхности осуществляется замена атома водорода атомом металла (рис. 1 (с)). В ИК спектрах наблюдается рост интенсивности высокочастотной полосы валентных колебаний v(NH) (3401 см⁻¹) и смещение частоты деформационных колебаний δ (NH) NH₂ группы от 1658 см⁻¹ к 1632 см⁻¹, что свидетельствует о наличии двух механизмов взаимодействия металла с аминогруппами (рис. 1 (с)).

Декорирование поверхности КТ Ag_2S/SiO_2 плазмонными НЧ Au приводит к увеличению квантового выхода рекомбинационной люминесценции в 10 раз с одновременным увеличением ее времени жизни от 4 нс до 200 нс (рис. 2 (a,b)). Такое поведение люминесцентных свойств КТ в рамках плекситонного взаимодействия может быть связано с эффектом Перселла, но при этом кинетика люминесценции определяется также переходами с участием локализованных состояний. Рекомбинационный характер свечения, а также дефектная структура интерфейсов КТ Ag_2S/SiO_2 предполагают вероятное влияние ближнего поля плазмонных НЧ Au на ловушки, участвующие в формировании кинетики затухания люминесценции. Концентрация и тип локализованных состояний интерфейсов КТ, а также их энергетические и оптические свойства являются ключевыми факторами фотопроцессов, определяющих возникновение люминесценции в коллоидных КТ и гибридных структурах на их основе, включая длительность существования электронного возбуждения и квантовый выход их люминесценции. Таким образом, сам характер наблюдаемой люминесценции нарушает простую связь изменения ее квантового выхода и времени жизни при декорировании КТ Ag₂S/SiO₂ мелкими плазмонными НЧ Au.

Для подтверждения предположения о влиянии плазмонных НЧ Au на динамику фотопроцессов, определяющих люминесценцию КТ Ag₂S/SiO₂, были проанализированы их спектры и кривые затухания люминесценции при температуре 77 К (рис. 2 (a, b)). Установлено, что понижение температуры до 77 К способствует разгоранию люминесценции КТ Ag₂S/SiO₂ в 12 раз, и увеличению ее времени жизни от 4 до 60 нс. Этот результат указывает на участие мелких ловушек в формировании кинетики люминесценции КТ Ag₂S наряду с электрон-фононным взаимодействием, определяющим температурное тушение центра излучательной рекомбинации.



Рис. 2. Спектры люминесценции КТ Ag₂S/SiO₂ при T=300 К – 1 и при T=77 К - 2; КТ Ag₂S/SiO₂/Au при T=300 К – 1' и при T=77 К – 2' (а). Кривые затухания люминесценции КТ Ag₂S/SiO₂ при T=300 К– 1 и при T=77 К - 2; КТ Ag₂S/SiO₂/Au при T=300 К – 1' и при T=77 К – 2' (b)

Квантовый выход КТ $Ag_2S/SiO_2/Au$ также возрастает в 2 раза при температуре 77 К (рис. 2 (а)). Однако тенденция изменения времени жизни в результате декорирования КТ Ag_2S/SiO_2 плазмонными НЧ Au при температуре 300 К и 77 К качественно аналогична (рис. 2 (b)). Такое поведение люминесцентных свойств КТ Ag_2S/SiO_2 в условиях плазмон-экситонного взаимодействия может быть обусловлено влиянием ближнего поля плазмонных НЧ Au на энергетические свойства (изменение глубины, сечения захвата и ионизации) мелких локализованных состояний КТ. Таким образом, наблюдаемое неспецифичное проявление плазмон-экситонного взаимодействия, вероятно, связано с эффектом Перселла, усложненного вкладом мелких ловушек в общую картину фотопроцессов, определяющих люминесценцию КТ Ag_2S/SiO_2 . Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 20-52-81005 ЕАПИ_т.

- 1. Complex plasmon-exciton dynamics revealed through quantum dot light emission in a nanocavity / S.N. Gupta et al. // Nat Commun. 2021. V. 12. P. 1310.
- 2. Plasmon-exciton interaction in colloidally fabricated metal nanoparticle-quantum emitter nanostructures / Y. Luo, J. Zhao // Nano Research. 2019. V. 12 (9). P. 2164

- 3. Non-blinking quantum dot with a plasmonic nanoshell resonator / B. Ji, et al. // Nature nano-technology. 2015. V. 10. P. 170.
- 4. Plasmonic fluorescent quantum dots / Y. Jin, et al. // Nat Nanotechnol. 2009. V. 4(9). P. 571.
- 5. The effect of the silica thickness on the enhanced emission in single particle quantum dots coated with gold nanoparticles / I.C. Serrano, et al. // RSC Adv. 2013. V. 3. P. 10691.

ПЛАЗМОН-ЭКСИТОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СМЕСЯХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdS И СЕРЕБРЯНЫХ НАНОСФЕР

В.Н. Дерепко, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов

Воронежский государственный университет 394018, г. Воронеж, Университетская площадь, 1 e-mail: viol.physics@gmail.com

1. Введение

В последние годы возрастает интерес к гибридным наноструктурам, построенным на основе полупроводниковых коллоидных квантовых точек (КТ) и плазмонных наночастиц (НЧ) [1]. Имеющиеся в литературе исследования направлены преимущественно на выявление условий, в которых при формировании гибридных наноструктур наблюдаются резонансные плеэкситонные эффекты. Выделяют три случая плазмон-экситонной связи: слабая (эффект Перселла), промежуточная (эффект Фано) и сильная (расщепление Раби) [2].

Общей особенностью большинства используемых образцов КТ являются узкие экситонные пики люминесценции. Они, как правило, имеют значительную степень перекрытия с пиками экстинкции НЧ. В этом случае при наблюдении эффекта Перселла существенное значение могут играть процессы безызлучательного переноса энергии от КТ к плазмонной НЧ.

Одним из наименее изученных вопросов в данной области является зависимость эффектов плеэкситонного взаимодействия от механизмов фотолюминесценции (ФЛ) КТ. В случае эмиссии на дефектах особенности влияния на ее параметры нанорезонаторов остаются малоизученными.

Таким образом, установление эффектов, объясняющих изменение спектральных свойств в гибридных плеэкситонных наноструктурах, в состав которых входят КТ, обладающие одновременно экситонной и рекомбинационной ФЛ, представляется актуальной задачей. В данной работе представлены результаты, демонстрирующие проявление плеэкситонного взаимодействия в виде трансформации ФЛ КТ CdS в присутствии НЧ Аg. Выявлены механизмы тушения экситонной ФЛ и разгорания рекомбинационной ФЛ КТ CdS при взаимодействии с НЧ Аg.

2. Экспериментальная часть

Компонентами гибридных наноструктур служили КТ CdS, покрытые олеиновой кислотой, и сферические HЧ Ag, пассивированные олеиламином. Принципы сборки гибридных ассоциатов основывались на возможности π -стекинг взаимодействия углеродного каркаса молекул пассиваторов, размер которых составлял от 1.34 до 1.8 нм. Дополнительная реакционная способность достигалась зарядом интерфейсов КТ и HЧ. Для формирования гибридных структур коллоидные растворы КТ CdS и HЧ Ag смешивали в молярных соотношениях [v(HЧ)]:[v(KT)] ~ 3·10⁻⁶ и [v(HЧ)]:[v(KT)] ~ 3·10⁻⁵ молярных долей (м.д.).

Исследование абсорбционных свойств КТ CdS и HЧ Ag осуществляли с использованием спектрометра USB2000+ (Ocean Optics, USA) с источником излучения USB-DT (Ocean Optics, USA). Спектры ФЛ КТ CdS исследовали с помощью USB2000+. Кинетику затухания люминесценции ис-

следовали с помощью платы время-коррелированного счёта фотонов TimeHarp 260 (PicoQuant, Germany) с модулем ФЭУ PMC-100-20 PMT (Becker & Hickl, Germany). Образцы возбуждали импульсным полупроводниковым лазером Alphalas PLDD-250 (Alphalas, Germany) с длиной волны 375 нм и длительностью импульса 60 пс. Измерения проводились при температуре 300К.

3. Результаты и обсуждения

На рис. 1 представлены ПЭМ микрофотографии синтезированных коллоидных КТ CdS и серебряных наночастиц. Наночастицы серебра сферической геометрии средним размером 10-15 нм присутствуют в образце как в виде отдельных частиц, так и небольших скоплений (рис.1 а). Коллоидные КТ имеют средний размер около 4 нм с дисперсией по размеру в пределах 15% (рис. 1 б). В смеси коллоидных КТ и серебряных НЧ заметная доля КТ CdS (маленькие серые частицы) расположена вблизи интерфейсов металлических наночастиц (крупные темные частицы). Следовательно, наблюдаемая картина однозначно свидетельствует в пользу сборки гибридных систем (рис.1 в).



Рис. 1. ПЭМ изображения Ag HЧ (a), КТ CdS (б) и их смесей (в)

Полоса экситонного перехода в поглощении КТ CdS расположена в области 410 нм (рис.2, зеленая кривая), что соответствует среднему размеру КТ 3.7 нм. Спектр ФЛ КТ CdS имеет две полосы. Первая полоса с максимумом при 430 нм отнесена к экситонной ФЛ, вторая полоса с максимумом около 603 нм относится к ФЛ, возникающей в результате излучательной рекомбинации на донорно-акцепторных парах [3].



Рис. 2. Оптические свойства КТ CdS, НЧ Ад и смесей на их основе

Максимум спектра экстинкции света НЧ Ад расположен при 415 нм (рис. 2, желтая кривая). Положение пика экстинкции согласуется с полученными значениями средних размеров 10-15 нм по данными ПЭМ (рис. 1), а также данными других работ [4].

Таким образом, спектральные свойства синтезированных компонентов обеспечивают значительное перекрытие пика экстинкции света НЧ Аg (415 нм) с экситонной полосой ФЛ (430 нм) и частичное перекрытие с полосой рекомбинационной ФЛ (603 нм).

Для исходного образца КТ CdS интенсивность экситонной ФЛ преобладает над рекомбинационной (рис.2, черная кривая). Однако в смеси с НЧ Ад для экситонной полосы ФЛ наблюдается тушение в области 430 нм (рис. 2, синяя и красная кривые). При этом зарегистрировано ускорение кинетики ФЛ, что указывает на безызлучательный резонансный перенос энергии (FRET) от экситона КТ CdS к НЧ Ад. Тушение экситонной ФЛ и сокращение её времени жизни усиливается с ростом концентрации акцепторов (НЧ Ад). Для максимальной концентрации НЧ время жизни ФЛ сокращается с 7.4 до 2.5 нс.

Для определения эффективности безызлучательного резонансного переноса энергии возбуждения воспользуемся средним временем жизни ФЛ КТ. Тогда

$$\varphi_1 = 1 - \frac{\langle \tau_{\text{KT}+\text{H}\text{H}} \rangle}{\langle \tau_{\text{KT}} \rangle},\tag{1}$$

где $\tau_{\text{KT}+\text{HY}}$ и τ_{KT} – средние времена жизни ФЛ КТ CdS в ассоциатах и отдельно КТ CdS.

С другой стороны, эффективность переноса также можно оценить из данных о тушении ФЛ КТ CdS с использованием выражения:

$$\varphi_2 = 1 - \frac{I_{\rm KT+HY}}{I_{\rm KT}},\tag{2}$$

где $I_{\text{KT}+\text{HY}}$ и I_{KT} – интенсивности ФЛ КТ CdS в ассоциатах и отдельно КТ CdS.

Видно, что эффективности оказались близки между собой для обеих из исследованных концентраций (табл.1). Это позволило сделать вывод о том, что тушение экситонной ФЛ в KT CdS при смешивании с Ag NPs определяется преимущественно процессами безызлучательного переноса энергии от экситона KT CdS к металлической наночастице.

Таблица 1

Оценка эффективности безызлучательного переноса энергии

Образец	ϕ_1	φ ₂
КТ CdS + НЧ Ag (3*10 ⁻⁵ м.д.)	0.66	0.79
КТ CdS + НЧ Ag (3*10 ⁻⁶ м.д.)	0.28	0.36

Для второй полосы ФЛ коллоидных КТ CdS обнаружено отличающееся поведение при сборке ассоциатов. Для образца ассоциатов КТ CdS и HЧ Ag [v(HЧ)]:[v(KT)] ~ $3\cdot10^{-5}$, напротив, наблюдается увеличение интенсивности ФЛ в 1.8 раза (рис.2, красная кривая), а для смеси [v(HЧ)]:[v(KT)] ~ $3\cdot10^{-6}$ – в 1.15 раз наряду с уменьшением времени жизни люминесценции.

Полученные результаты указывают на эффект Перселла [5]. По-видимому, наночастицы серебра выполняют роль нанорезонаторов, моды колебаний которых близки к частоте максимума рекомбинационной ФЛ КТ CdS.

Данные об изменении среднего времени жизни и квантового выхода рекомбинационной ФЛ КТ CdS при сборке ассоциатов позволяют оценить фактор Перселла, который равен:

$$F_P = \frac{\gamma_{sp}}{\gamma_{sp}^0} = \frac{QY \cdot \tau^0}{QY^0 \cdot \tau},\tag{3}$$

где γ_{sp}^0 и γ_{sp} – скорость спонтанных переходов в отсутствии и присутствии НЧ, QY^0 и QY– квантовый выход ФЛ в отсутствии и присутствии НЧ, τ^0 и τ среднее время жизни ФЛ в отсутствии и присутствии НЧ. Полученная величина с учётом квантового выхода рекомбинационной ФЛ $QY^0 = 0.3$ и 0.5 без и с НЧ Ад оказывается равной Fp = 5.3. С другой стороны, фактор Перселла можно оценить, зная добротность и модовый объём резонатора. При этом нами учтена существенная расстройка резонансов резонатора и ФЛ квантовых точек. Для этого мы использовали выражение, вывод которого осуществлен Bunkin F.V., Oraevskii A.N. [6]:

$$F_{p} = \frac{3\lambda_{r}^{3}}{4\pi^{2}QV_{m}} \frac{\omega_{r}^{2}}{(\omega_{r}^{2}/Q^{2} + (\omega_{r} - \omega_{0})^{2})},$$
(4)

где Q и V_m – добротность и модовый объем резонатора, λ – длина волны излучения в среде, в которой находится резонатор, ω_0 – частота излучательного перехода в КТ. Приближённо модовый объём сферического нанорезонатора можно оценить по формуле из [7]. Добротность резонатора определяли из литературных данных о полуширине спектра экстинкции монодисперсных частиц серебра $Q = \omega_r / \Delta \omega_r \approx 41$ [8].

Оценка фактора Перселла из формулы (4) дало величину $F_p = 180$. Это значение превышает полученное нами. Однако оно не является точным и определяет предельно достижимую величину. Выражение (4) не учитывает расстояние между плазмонной наночастицей и КТ, которое имеет существенное значение для реальной величины фактора Перселла [9].

4. Выводы

Таким образом, величина экспериментально определённого фактора Перселла позволяет заключить, что в исследуемых гибридных ассоциатах скорость спонтанного перехода возрастает более чем в 5 раз, и это также является доводом в пользу сборки металл-полупроводниковой структуры, в которой осуществляется режим слабой плазмон-экситонной связи.

Работа поддержана грантом Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ, проект НШ-2613.2020.2.

- 1. Zhang H, Su Q., Chen S. Quantum-dot and organic hybrid tandem light-emitting diodes with multi-functionality of full-color-tunability and white-light-emission // Nature Communications. 2020. V. 11. P. 2826–1–8.
- Leng H., Szychowski B., Daniel M.-Ch., Pelton M. Strong coupling and induced transparency at room temperature with single quantum dots and gap plasmons // Nature Communications 2018. V. 9. P. 4012.
- Ovchinnikov O.V., Smirnov M.S., Korolev N.V., Golovinski P.A., Vitukhnovsky A.G. The size dependence recombination luminescence of hydrophilic colloidal CdS quantum dots in gelatin // J. of Lumines. 2016. V. 179. P. 413–419.
- S. Peng, J. M. McMahon, G. C. Schatz, S. K. Gray, Y. Sun Reversing the size-dependence of surface plasmon resonances // Proceedings of the National Academy of Sciences 2010.
 V. 107. № 33. P. 14530–14534.

- 5. E.M. Purcell. Spontaneous emission probabilities at radio frequencies // Physical Review. 1946. V. 69. № 11–12. P. 681.
- 6. Oraevsky A.N. Spontaneous emission in a cavity // Physics-Uspekhi 1994. V. 37. № 4. P. 393–405.
- Sun G., Khurgin J.B., Soref R.A. Plasmonic light-emission enhancement with isolated metal nanoparticles and their coupled arrays // Journal of the Optical Society of America B 2008. V. 25.
 № 10. P. 1748.
- Pinchuk A., von Plessen G., Kreibig U. Influence of interband electronic transitions on the optical absorption in metallic nanoparticles // Journal of Physics D: Applied Physics 2004. V. 37. N

 № 22. P. 3133–3139.
- Guzatov D. V., Vaschenko S. V., Stankevich V. V., Lunevich A. Y., Glukhov Y. F., Gaponenko S. V. Plasmonic Enhancement of Molecular Fluorescence near Silver Nanoparticles: Theory, Modeling, and Experiment // The Journal of Physical Chemistry C 2012. V. 116. № 19. 10723–10733.
УМЕНЬШЕНИЕ ОШИБКИ ТЕЛЕПОРТАЦИИ С ПОМОЩЬЮ КУБИЧЕСКОГО ФАЗОВОГО ЗАТВОРА

Э.Р. Зинатуллин, С.Б. Королев, Т.Ю. Голубева

Санкт-Петербургский государственный университет 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9 e-mail: e.r.zinatullin@mail.ru

1. Введение

Схема телепортации квантовых состояний входит в число базовых протоколов квантовой обработки информации [1-5]. Именно этот протокол лежит в основе одной из перспективных моделей универсальных квантовых вычислений — однонаправленных квантовых вычислений [6-8]. В нашей работе мы будем обсуждать протокол телепортации квантовых состояний в режиме непрерывных переменных. В отличие от дискретных квантовых систем, использование непрерывных переменных. В отличие от дискретных квантовых систем, использование непрерывных переменных позволяет строить детерминированные схемы. Однако работа с непрерывными квантовыми системами обладает и существенным недостатком: наличием неустранимых ошибок, связанных с конечной степенью сжатия состояний, используемых как ресурс для телепортации. Этот недостаток наследуют и однонаправленные квантовые вычисления в непрерывных переменных. Сжатие, которое экспериментально достижимо на данный момент, оказывается недостаточным для осуществления отказоустойчивых универсальных однонаправленных квантовых вычислений: максимальное экспериментально достижимое сжатие -15 дБ [9], тогда как для вычислений (без использования поверхностных кодов и процедуры постселекции) необходимо -20.5 дБ [10]. В связи с этим уменьшение неустранимых ошибок для квантовых вычислений в непрерывных переменных остается важной теоретической задачей.

Один из вариантов повышения точности телепортации — это использование перепутанных негауссовых состояний в качестве ресурса для телепортации, этот эффект продемонстрирован в работах [11, 12]. Способ получения такого ресурса основан на использовании процедуры условного вычитания или добавления фотонов, примененной к гауссовому перепутанному состоянию. Однако, имея в виду свойство детерминированности протоколов в непрерывных переменных, негауссово состояние, полученное путем добавления/вычитания фотонов, теряет это преимущество, процедура носит вероятностный характер.

В связи с этим мы задались вопросом: какие еще негауссовы операции можно использовать для увеличения точности телепортации? Сможем ли мы получить какие-нибудь новые преимущества при их использовании? Возможно ли увеличить точность телепортации, оставаясь в рамках детерминированных процессов? В качестве исследуемого преобразования нами было выбрано преобразование кубической фазы [13].

2. Телепортация с кубическим фазовым затвором

В статье [14] мы показали, что, заменив в традиционном протоколе телепортации два светоделителя на преобразования CZ (рис. 1), возможно уменьшить ошибку в одной из квадратур за счет весовых коэффициентов преобразования CZ [15, 16].



Рис. 1. Схема реализации телепортации с помощью двух преобразований СZ. На схеме: In – входное (телепортируемое) состояние; S₁ и S₂ – осцилляторы, сжатые по *у*-квадратуре;

C_Z(g_i) – преобразования СZ с весовыми коэффициентами *g_i*; *y* – гомодинные детекторы, измеряющие *y*-квадратуру поля в канале; X и Y обозначают устройства, смещающие соответствующие квадратуры полей в канале в зависимости от результатов детектирования

В работе [17] мы модифицируем схему телепортации с двумя операциями CZ, используя кубический фазовый затвор, чтобы уменьшить уровень ошибок в обеих квадратурах (рис. 2). В нашей схеме сжатое по х-квадратуре состояние смещается по у-квадратуре на фиксированную величину α . После этого к нему применяется преобразование кубической фазы. Полученное таким образом состояние выступает в качестве негауссового ресурса для телепортации.



Рис. 2. Схема телепортации с использованием кубического фазового затвора. На схеме: S₁ и S₂ – осцилляторы, сжатые в ортогональных квадратурах; Y_{α} – обозначает смещение *у*-квадратуры на фиксированную величину α ; Q_{γ} – кубический фазовый затвор с коэффициентом преобразования γ

Мы описали процедуру телепортации в нашей схеме в картине Гейзенберга и оценили качество телепортации с точки зрения добавления ошибки. Оказалось, что в приближении, когда величина сдвига α много больше дисперсии растянутой квадратуры сжатого состояния, ошибка в одной из квадратур может быть подавлена путем увеличения α .

Однако картина Гейзенберга не позволяет напрямую оценить качество телепортации конкретных квантовых состояний. Кроме того, нам пришлось прибегнуть к приближениям, ограничивающим применимость полученного нами результата. Поэтому мы дополнительно описали процедуру телепортации в картине Шредингера без каких-либо приближений. Это

позволило нам оценить верность телепортации состояния и продемонстрировать границы применимости предлагаемого подхода.

На примере телепортации вакуумного состояния и сжатых состояний мы показали, что схема позволяет достичь высоких значений точности. На рис. 3 показаны плотность вероятности *P* измерения значений $y_{1,m}$ и $y_{in,m}$ и значение верности *F* в зависимости от $y_{1,m}$ и $y_{in,m}$ при телепортации вакуумного состояния для разных значений сдвигов α . При расчетах сжатие ресурсных осцилляторов мы положили равным -15 дБ, а значение коэффициента преобразования кубической фазы $\gamma = 0.1$. Из графиков видно, что при $\alpha = 20$ телепортация будет осуществляться с высокой точностью, и при этом не требуется дополнительной селекции по результатам измерений. Сдвиги такого порядка возможно реализовать на практике.



Рис. 3. Плотность вероятности измерения значений *y*_{1,m} и *y*_{*in*,m} и значение верности в зависимости от *y*_{1,m} и *y*_{*in*,m} при телепортации вакуумного состояния для сдвигов ресурсного негауссового состояния *α* = 6, 10, 20

3. Заключение

Мы показали, что за счет использования кубического фазового затвора можно уменьшить ошибку телепортации в одной из квадратур. Мы показали это, проанализировав нашу схему с точки зрения добавления ошибки при телепортации на языке Гейзенберга. Дополнительно мы описали схему на языке волновых функций и продемонстрировали, что для выполнения допущенных нами приближений требуется выполнить относительно небольшие сдвиги сжатого состояния до применения преобразования кубической фазы. Эти сдвиги возможно реализовать на практике. При необходимости среднюю точность телепортации можно увеличить за счет селекции по результатам измерений. Селекция оказывается необходимой, если нет возможности сдвинуть сжатое состояние на достаточную величину.

По сравнению со схемой телепортации с вычитанием/добавлением фотонов наша схема обладает значительным преимуществом — при достаточном значении сдвига она работает детерминированным образом и не требует дополнительной селекции по результатам измерений.

Особенностью нашего протокола является то, что для его работы возможно использование кубического фазового затвора с невысокой степенью нелинейности. Это является важным преимуществом ввиду того, что увеличение степени нелинейности кубического фазового затвора является сложной экспериментальной задачей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19–02-00204а) и фонда развития теоретической физики и математики «Базис» (грант № 21-1-4-39-1).

- C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres and W. K. Wootters. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 1895.
- 2. L. Vaidman. Teleportation of quantum states // Phys. Rev. A. 1994. V. 49. P. 1473.
- 3. D. Bouwmeester, J.-W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter and A. Zeilinger. Experimental quantum teleportation // Nature. 1997. V. 390. P. 575.
- 4. S. L. Braunstein and H. J. Kimble. Teleportation of Continuous Quantum Variables // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 869.
- A. Furusawa, J. L. Sørensen, S. L. Braunstein, C. A. Fuchs, H. J. Kimble and E. S. Polzik. Unconditional Quantum Teleportation // Science. 1998. V. 282. P. 706.
- N. C. Menicucci, P. van Loock, M. Gu, C. Weedbrook, T. C. Ralph and M. A. Nielsen. Universal Quantum Computation with Continuous-Variable Cluster States // Phys. Rev. Lett. 2006.
 V. 97 P. 110501.
- R. Raussendorf and H. J. Briegel. A One-Way Quantum Computer // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. P. 5188.
- M. A. Nielsen. Cluster-state quantum computation // Reports on Mathematical Physics. 2006.
 V. 57. P. 147.
- H. Vahlbruch, M. Mehmet, K. Danzmann and R. Schnabel. Detection of 15 dB Squeezed States of Light and their Application for the Absolute Calibration of Photoelectric Quantum Efficiency // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 117. P. 110801.
- 9. N. C. Menicucci. Fault-Tolerant Measurement-Based Quantum Computing with Continuous-Variable Cluster States // Phys. Rev. Lett. 2014. V. 112. P. 120504.
- 10. T. Opatrny, G. Kurizki and D.-G. Welsch. Improvement on teleportation of continuous variables by photon subtraction via conditional measurement // Phys. Rev. A. 2000. V. 61. P. 032302.
- 11. P. T. Cochrane, T. C. Ralph and G. J. Milburn. Teleportation improvement by conditional measurements on the two-mode squeezed vacuum // Phys. Rev. A. 2002. V. 65. P. 062306.
- D. Gottesman, A. Kitaev and J. Preskill. Encoding a qubit in an oscillator // Phys. Rev. A. 2001.
 V. 64. P. 012310.
- 13. E. R. Zinatullin, S. B. Korolev and T. Yu. Golubeva. Controlled-Z operation versus the beam-splitter transformation: Errors of entangled operations // Phys. Rev. A. 2021. V. 103. P. 062407.

- M. V. Larsen, J. S. Neergaard-Nielsen and U. L. Andersen. Architecture and noise analysis of continuous-variable quantum gates using two-dimensional cluster states // Phys. Rev. A. 2020. V. 102. P. 042608.
- J. Zhang and S. L. Braunstein. Continuous-variable Gaussian analog of cluster states // Phys. Rev. A. 2006. V. 73. P. 032318.
- 16. E. R. Zinatullin, S. B. Korolev and T. Yu. Golubeva. Teleportation with a cubic phase gate // Phys. Rev. A. 2021. V. 103. P. 032420.

КВАНТОВЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ЗАДАЧ ПОИСКА МИНИМАЛЬНОГО ПУТИ

А.В. Корюкин

Казанский федеральный университет, Институт физики 420008, Казань, улица Кремлевская 16а Академия наук Республики Татарстан, 420111, Казань, улица Баумана 20 e-mail: Artem.Koryukin@kpfu.ru

1. Введение

В настоящий момент квантовые вычисления находятся на стадии бурного развития. Совершенствование кубитов и схем на их основе дают оптимизм в прогнозировании того, что данная область внесет огромный вклад в технологический прогресс человечества. На текущий момент идет разработка алгоритмов для использования данных систем в различных областях, например, в машинном обучении, задачах оптимизации, финансах, физике, биологии и др. В последних упомянутых направлениях это расчет основного и возбужденного состояний электронных и колебательных уровней, потенциальной энергии, сворачивание белка [1,2]. Использование квантовых компьютеров приведет к существенному ускорению решения задач, которые классическим способом решаются долго. Например, это важно при расшифровке генома человека и подбора индивидуального лечения [3]. Вместе с этим, можно получить точные решения квантово-механических задач, где классическая теория дает лишь приближенный ответ, например, расчет энергии связи молекул.

В этой статье рассмотрена одна из задач оптимизации, а именно задача поиска минимальных путей обхода [4]. В общем случае, это задача максимального разреза графа, а именно, рассматривается задача поиска минимального пути. Общая формулировка представляет собой следующее: дано N – количество произвольно расположенных точек, и необходимо найти такую траекторию через эти точки, чтобы путь, равный пройденному расстоянию между всеми этими точками, был минимален при условии, что через каждую точку нужно пройти только один раз. То есть решение будет представлять собой последовательность точек. Вначале будет идти начальная точка, с которой будет происходить старт алгоритма, затем все остальные. Точки расположены на плоскости в произвольном порядке, задается лишь начальная точка.

2. Результаты

Были рассмотрены два случая задачи: в первом случае решение должно представлять собой одну последовательность из этих точек. Во втором случае – две последовательности, то есть точки обходятся двумя траекториями. Другими словами, множество точек разбивается на два непересекающихся подмножества, которые обходятся одновременно, не содержат общие точки и в сумме дают исходное множество. Таким образом, набор точек разбивается на два кластера.

Для решения данной задачи были использованы два классических метода и два квантовых симулятора с использованием вариационного квантового собственного решателя (VQE). В качестве классических методов для сравнения были выбраны метод перебора, так называемый *brute force*, и метод на основе гамильтониана Изинга. В качестве наиболее используемых в квантовых вычислениях IBM нами были рассмотрены квантовые симуляторы Statevector и QASM [5]. Языком квантового программирования был выбран Qiskit (IBM). Варьируемым параметром было количество пунктов обхода, которое составляло от 3 до 5, в связи с тем, что основные квантовые симуляторы позволяют моделировать не более 32 кубитов. В рассматриваемых алгоритмах число кубитов определяется квадратом количества точек.

Таблица 1

Количество	Метод	Классический	VQE	Оптимизация
точек / время (с)	перебора	алгоритм на основе		на VQE
		гамильтониана		
		Изинга		
3	0.042	0.167	11.971	9.017
4	0.030	0.844	432.187	428.822

Время выполнения алгоритмов для количества точек от 3 до 4, первый случай

Самое быстрое время показал классический метод перебора независимо от количества точек, что можно увидеть в таблице 1. Классический собственный решатель (Изинг) показал на порядок большее время, а для пяти точек требует большие вычислительные ресурсы, чем первый метод. Квантовый симулятор, моделирующий квантовую схему путем вычисления волновой функции вектора состояния кубита по мере применения вентилей и инструкций (Statevector), считает на два порядка дольше и для случаев 4 и 5 точек требует гораздо больше ресурсов, чем предыдущие методы. В связи с этим, был использован универсальный квантовый симулятор (QASM) для моделирования квантовых схем. В таком симуляторе метод моделирования выбирается автоматически на основе входных цепей и параметров. Тогда время расчета увеличивается на три порядка. Для случая с 5 точками также наблюдается заметное увеличение требования к ресурсам по сравнению с классическими методами.

Для количества точек, равного трем, рассчитанное минимальное расстояние оказалось одинаковым для всех методов, что можно увидеть в таблице 2. Для количества точек, равного четырем, самое оптимальное решение, то есть решение с минимальным расстоянием, снова показали классические методы. Использование оптимизации VQE не дало уменьшения минимального расстояния.

Таким образом, использование рассматриваемых квантовых алгоритмов на используемых квантовых симуляторах не только не дало преимущества, но и оказалось медленнее. Так же оптимизация VQE не дала эффективного улучшения результата.

Количество точек /	Метод	Классический	VQE	Оптимизация
расстояние (отн. ед.)	перебора	алгоритм на основе		на VQE
		гамильтониана		
		Изинга		
3	202.0	202.0	202.0	202.0
4	236	236	302	302

Расстояние, полученное в результате выполнения алгоритмов для количества точек от 3 до 4, первый случай

Далее был рассмотрен случай с возможностью параллельного обхода предоставленных точек, где коэффициент параллельности был выбран 2. Для всех трех выбранных точек, в отличие от первого случая, алгоритм смог получить решение в реальном времени с использованием тех же вычислительных ресурсов. Выше упомянутый универсальный квантовый симулятор имел время расчета в 5 – 1000 раз (в зависимости от количества точек) больше, чем классический метод IBM ILOG CPLEX, что показано в таблице 3. С ростом количества точек росла разница в себестоимости полученного решения – увеличивалось расстояние пути обхода точек для случая квантового симулятора по сравнению с классическим методом, что показано в таблице 4.

Таблица 3

Количество точек /	Классическое	Квантовое
время (с)	решение	решение
3	0.229	1.088
4	0.181	15.028
5	0.164	1566.896

Время выполнения алгоритмов для количества точек от 3 до 5, второй случай

Таблица 4

Расстояние, полученное в результате выполнения алгоритмов для количества точек от 3 до 5, второй случай

Количество точек /	Классическое	Квантовое
расстояние (отн. ед.)	решение	решение
3	132	132
4	124	127
5	98	11732

На рисунке 1 представлена карта классического решения, а на рисунке 2 – карта квантового решения. Видно, насколько не оптимально квантовое решение.



Рис. 1. Классическое решение для 5 точек



Рис. 2. Решение с использованием универсального квантового симулятора для 5 точек

3. Заключение

Таким образом, на текущий момент использование вышеупомянутых квантовых симуляторов (Statevector и QASM) не представляется оптимальным для задач поиска оптимальных путей обхода с небольшим количеством точек. Стоит сразу отметить, что преимущества квантовых вычислений окажутся гораздо существенными при увеличении количества точек, оптимизации алгоритмов и увеличения количества кубитов, то есть, реализации задачи на самих квантовых компьютерах. Данная работа рассматривает возможность применения существующих решений с использованием квантовых алгоритмов на локальных системах для образовательных и исследовательских целей. В связи с тем, что преимущества квантовых вычислений могут появиться при большем количестве точек, следовательно, нужно большее количество кубитов, то рекомендуется рассматривать эффективный симулятор схем Клиффорда (Stabilizer) с максимальным количеством

симулируемых кубитов, равным 5000. С одной стороны, рассматриваемые общие подходы и принципы могут найти применение в оптимизационных задачах в физике. С другой стороны, решение может пригодиться для поиска оптимальной конфигурации новых (мета)материалов и фотонных схем на их основе. Таким образом, рассматриваемая задача представляет интерес для широкого круга исследователей в различных областях науки и техники.

- 1. Robert A., Barkoutsos P.K., Woerner S. Tavernelli I. Resource-efficient quantum algorithm for protein folding // npj Quantum Inf 2021 V. 7. P. 38.
- 2. Qiskit [сайт]. URL: https://qiskit.org/documentation/nature/
- 3. Boev A. S., Rakitko A. S., Usmanov S. R., Kobzeva A. N., Popov I. V., Ilinsky V. V., Kiktenko E. O., Fedorov A. K. Genome assembly using quantum and quantum-inspired annealing // Sci Rep 2021 V. 11. P. 13183.
- 4. Qiskit [сайт]. URL: https://qiskit.org/documentation/optimization/
- 5.
 Quantum computing.ibm [сайт]. URL:

 https://quantumcomputing.ibm.com/services/docs/services/manage/simulator/

ГИБРИДИЗАЦИЯ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ И ИНТЕГРИРУЕМОСТИ МОДЕЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В ОПТОВОЛОКОННЫХ СИСТЕМАХ С НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

И.А. Кук^{1,*}, Дж. Гибни², Е.А. Лопухова³, И.Р. Габитов^{1,2}

¹Сколковский институт науки и технологий 121205, г. Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1, Россия ²Аризонский университет 85721, г. Тусон, 617 N Santa Rita Ave, США ³Уфимский государственный авиационный технический университет 450008, г. Уфа, Карла Маркса 12, Россия *e-mail: ilya.kuk@skoltech.ru

1. Введение

Быстрое развитие информационных технологий сопровождается ростом требований к производительности оптоволоконных систем [1]. В свою очередь, повышение скорости передачи информации увеличивает влияние нелинейности оптического волокна на динамику оптического сигнала [2]. Нелинейные эффекты являются дополнительным источником ошибок декодирования, ограничивая производительность систем передачи. В данной работе изучается возможность подавления эффектов нелинейности на основе гибридизации свойств интегрируемости модельных уравнений с алгоритмами машинного обучения.

2. Математическая модель и ее свойства

В простейшем случае распространение сигнала вдоль оптического волокна с хорошей точностью описывается нелинейным уравнением Шрёдингера (НУШ) [3]. Безразмерная форма модельного уравнения НУШ имеет следующий вид:

$$iE_{z} + \frac{1}{2}E_{tt} + |E|^{2}E = 0, \qquad (1)$$

где E = E(t, z) – безразмерная амплитуда огибающей электрического поля, t и z – безразмерные время и координата, вдоль которой происходит эволюция. Данное уравнение относится к классу интегрируемых систем. С уравнениями такого типа связана пара линейных дифференциальных матричных уравнений, содержащих свободный комплексный параметр. Условием совместности такой пары является исходное нелинейное уравнение. В случае нелинейного уравнения Шредингера пара Лакса имеет следующий вид:

$$\Psi_{t} = i(\lambda\sigma_{3} + U)\Psi, \qquad \Phi_{3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 0 & E \\ E^{*} & 0 \end{pmatrix}, \quad V = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} |E|^{2} & iE_{t} \\ -iE_{t}^{*} & -|E|^{2} \end{pmatrix},$$
(2)

где Ψ – неизвестная матрица 2×2, λ – произвольный комплексный параметр. Из условия совместности данной системы $\Psi_{tz} = \Psi_{zt}$ следует НУШ (1). Первое уравнение Лаксовой пары

можно интерпретировать как спектральную задачу рассеяния, потенциал которой образован решениями НУШ, убывающими при $E(t, z) \xrightarrow[t \to \pm\infty]{} 0$, где λ выполняет роль спектрального параметра.

Рассмотрим задачу рассеяния относительно первого уравнения системы (2) со следующими асимптотиками:

$$\lim_{t \to -\infty} \Psi = \begin{pmatrix} e^{-i\lambda t} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lim_{t \to +\infty} \Psi = \begin{pmatrix} a(z,\lambda)e^{-i\lambda t} \\ b(z,\lambda)e^{+i\lambda t} \end{pmatrix}.$$
(3)

Соответствующий коэффициент отражения $r(z, \xi)$ определяется следующим образом:

$$r(z,\xi) = \frac{b(z,\lambda)}{a(z,\lambda)}.$$
(4)

Важным свойством коэффициента рассеяния является то, что его эволюция вдоль волокна подчиняется линейному уравнению Шрёдингера, записанному в фурье- пространстве:

$$r_z - 2i\lambda^2 r = 0. ag{5}$$

Краевая задача $E_0(t) = E(t,0)$ для НУШ может быть решена путем следующей последовательности операций: (i) решение прямой задачи рассеяния, нахождения $r_0(\lambda) = r(0,\lambda)$ для потенциала, определяемого краевым условием $E_0(t)$; (ii) решение линейного уравнения Шредингера (5) с краевым условием $r_0(\lambda)$ в произвольной точке z; (iii) решение обратной задачи рассеяния: восстановление потенциала E(t, z) по известному коэффициенту рассеяния $r(z, \lambda)$.

Такой подход впервые был разработан Гарднером и др. [4] для нахождения бесконечного семейства точных решений уравнения Кортевега – де Фриза. В литературе он известен как метод обратной задачи рассеяния. Интегрируемость и применение метода обратной задачи рассеяния к НУШ впервые продемонстрированы в работах Захарова и Шабата [5,6].

3. Гибридизация метода обратной задачи рассеяния и машинного обучения

Основной технологией современной высокоскоростной телекоммуникации является метод линейной когерентной оптической передачи информации. По мере распространения битовой последовательности вдоль волокна происходит дисперсионное уширение и перекрытие оптических импульсов, описываемое линейным уравнением Шредингера. Для восстановления исходной битовой последовательности используется цифровое "обратное распространение" – Digital Back-Propagation (DBP) [7]. Для того чтобы распространить принципы когерентной оптической коммуникации на случай нелинейного режима работы, мы предлагаем применять DBP не к оптическому сигналу непосредственно, а к коэффициенту отражения $r(z,\lambda)$, соответствующему оптическому полю на выходе системы. В таком случае для восстановления переданного сигнала в точке приема z = L, где L – длина передающей линии, необходимо дополнительно решить две задачи: прямую задачу рассеяния – найти коэффициент отражения $r(L,\lambda)$ по выходному сигналу E(L,t), затем коэффициент отражения "отмотать назад" с помощью DBP, таким образом получив коэффициент отражения $r(0,\lambda)$, соответствующий входному сигналу, и наконец решить обратную задачу рассеяния переданный сигнал E(0,t) по известным данным рассеяния $r(0,\lambda)$, схематически идея данного подхода изображена на рис. 1а.



Рис. 1. а) Схема восстановления сигнала с использованием метода обратной задачи рассеяния; б) Модель нейронной сети для решения обратной задачи рассеяния

В общем случае восстановление потенциала по известным данным рассеяния может быть осуществлено путем решения линейных интегральных уравнений Гельфанда-Левитана-Марченко либо методом задачи Римана-Гильберта [6,8]. Практическая реализация этих подходов требует использования значительных вычислительных ресурсов [9]. Для того чтобы преодолеть ограничения традиционных подходов, мы предлагаем решать обратную задачу рассеяния с использованием алгоритмов машинного обучения.

В ходе экспериментов было обнаружено, что для этого достаточно использовать только линейную регрессию. Линейный характер регрессии является вполне ожидаемым, поскольку уравнения Гельфанда-Левитана-Марченко, а также задача Римана-Гильберта являются линейными. Структура нейронной сети (НС) изображена на рис. 16: модель разделяет входные комплексные данные (коэффициент отражения) на реальную и мнимую части и параллельно пропускает их через полностью связанные слои FC real и FC imag, затем выходы этих слоев склеиваются (Concat) и пропускаются через выходной полно-связный слой FC out, активационные функции при этом не используются.

4. Генерация данных и тренировка

В качестве граничного условия для уравнения (1) мы рассматриваем 16-битовые последовательности гауссовых импульсов (рис. 3а, сплошная синяя линия), заданные формулой

$$E(0,t) = \sum_{k=1}^{N} a_k \pi^{-\frac{1}{4}} \exp\left[-(t-kT)^2/2\right],$$
(6)

где $a_k = \pm 1$ с равной вероятностью, k – номер импульса, T = 10 – ширина битового слота. В процессе генерации данных для входной последовательности битов (6) решается прямая задача рассеяния численным методом в соответствии с работой [10], таким образом находится коэффициент отражения (см. пример Рис. 2). Совокупность входных последовательностей битов и соответствующих им коэффициентов отражения составляет набор тренировочных данных, включающий в себя 3000 реализаций.

На вход НС в качестве элементов множества данных для обучения подаются значения коэффициентов отражения, соответствующие известным битовым последовательностям.

Набор данных для тестирования модели состоит из других случайных реализаций последовательностей такой же формы, однако коэффициент отражения в этом случае подсчитан в точке z = L = 100 в соответствии с решением уравнения (1), что составляет 100 нелинейных длин, затем к данным рассеяния была применена процедура линейного восстановления DBP.



Рис. 2. Пример зависимости абсолютного значения коэффициента отражения от реальной части спектрального параметра

В качестве функции потерь была выбрана среднеквадратичная ошибка модели (MSE). Для обучения использовался оптимизационный алгоритм Adam [11]. Сравнение переданного сигнала (цели) с предсказанием модели изображено на рис. 3. Значения потерь на тренировочном наборе данных составляют 0.001 на тестовом – 0.006.



Рис. 3. Валидация НС на тренировочном (а) и тестовом (б) наборах данных; синяя сплошная линия – переданный сигнал (цель), коричневая пунктирная линия – предсказание модели; нижняя и верхняя части – разные реализации последовательностей

5. Заключение

Показано, что применение метода обратной задачи рассеяния совместно с машинным обучением является эффективным способом восстановления оптического сигнала, подвергшегося сильным нелинейным искажениям.

- Odlyzko A.M. Internet traffic growth: Sources and implications // Optical transmission systems and equipment for WDM networking II. International Society for Optics and Photonics, 2003. V. 5247. P. 1–15.
- Gibney J., Kuk I.A., Gabitov I.R. Pulse interactions in weakly nonlinear coherent optical communication links // Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing. 2021. V. 1890, № 1. P. 012006.
- Hasegawa A., Kodama Y. Guiding-center soliton // Physical Review Letters. 1991.
 V. 66, №2. P. 161.
- 4. Gardner C. S. et al. Method for solving the Korteweg-deVries equation // Physical Review Letters. 1967. V. 19. № 19. P. 1095.
- 5. Zakharov V., Shabat A. Exact theory of two-dimensional self-focusing and one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media // Soviet physics JETP. 1972. V. 34. № 1. P. 62.
- 6. Novikov S. et al. Theory of solitons: the inverse scattering method. Springer Science & Business Media, 1984.
- 7. Kikuchi K. Fundamentals of coherent optical fiber communications // Journal of Lightwave Technology. 2015. V. 34. № 1. P. 157–179.
- 8. Захаров В.Е., Шабат А.Б. Схема интегрирования нелинейных уравнений математической физики методом обратной задачи рассеяния. І // Функциональный анализ и его приложения. 1974. Т. 8. № 3. С. 43–53.
- 9. Trogdon T., Olver S. Numerical inverse scattering for the focusing and defocusing nonlinear Schrödinger equations // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2013. V. 469. № 2149. P. 20120330.
- 10. Mullyadzhanov R., Gelash A. Direct scattering transform of large wave packets // Optics Letters. 2019. V. 44. № 21. P. 5298–5301.
- 11. Kingma D.P., Ba J. Adam: A method for stochastic optimization // arXiv preprint arXiv:1412.6980. 2014.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПАРАМЕТРОВ СТОКСА С УЧЕТОМ МЕЖМОДОВОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

С.С. Медведева¹, А.А. Гайдаш^{1,2}, Г.П. Мирошниченко³, А.Д. Киселев¹, А.В. Козубов^{1,2}

¹Лаборатория Квантовых процессов и измерений, Университет ИТМО 199034, Санкт-Петербург, Кадетская линия В.О., д.3, кор.2, лит.А ²Отдел математических методов квантовых технологий, Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук 119991, Москва, ул. Губкина, д. 8 ³Институт Высшая инженерная школа, Университет ИТМО 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49 e-mail: ss_medvedeva@itmo.ru

1. Введение

Теория открытых квантовых систем в настоящее время широко используется для описания различных особенностей динамик квантовых состояний [1]. Так, для случая рассмотрения оптоволоконного канала с распространяющимся по нему многомодовым квантовым состоянием электромагнитного поля поляризационная динамика может быть описана при помощи системы уравнений Горини–Коссаковского–Сударшана–Линдблада (ГКСЛ) [2, 3].

Ранее были использованы разные подходы к решению проблемы описания динамики квантовых состояний с помощью уравнения ГКСЛ. Так, в [4] с помощью формализма SU(1,1) алгебры рассматривалась динамика первых моментов операторов Стокса [5] для одномодовых квантовых состояний в линейном приближении по среднему числу тепловых фотонов. В [6] рассматривались динамические уравнения для средних значений без приближений. Работа [7] была посвящена анализу поляризационной динамики двумодовых квантовых состояний: метод жордановых отображений позволил найти уравнения динамики первых моментов операторов Стокса с учетом межмодового взаимодействия, вызванного анизотропией среды распространения.

В данной работе рассматривается поляризационная динамика двумодовых бозонных квантовых состояний, описываемая уравнениями ГКСЛ. Используется метод вывода динамических уравнений для средних значений интересующих операторов (подстановка в уравнения и применение операции взятия следа) как в [6]. В продолжение работы [7] исследуется динамика параметров Стокса ряда двумодовых квантовых состояний: сжатое вакуумное, сжатое когерентное, суперпозиция когерентных состояний с учетом межмодового взаимодействия.

2. Постановка задачи

Двумодовое квантовое состояние электромагнитного поля, динамика поляризации которого рассматривается, в начальный момент времени имеет вид:

$$\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2 , \qquad (1)$$

где состояние одной поляризационной моды было вариативным: сжатое вакуумное состояние, или сжатое когерентное состояние или суперпозиция когерентных состояний, тогда как состояние другой моды было взято вакуумным [8]. Описание диссипативной динамики квантового состояния $\hat{\rho}(t)$ производилось с помощью уравнения Лиувилля (частный случай мастер-уравнения ГКСЛ):

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{2} \left[\widehat{\Omega}, \widehat{\rho}(t) \right] - \frac{2n_T + 1}{2} \left[\widehat{\Gamma}, \widehat{\rho}(t) \right] \\ + \sum_{n,m} \Gamma_{nm} \left((n_T + 1) \left[\widehat{a}_m, \widehat{\rho}(t) \widehat{a}_n^{\dagger} \right] + n_T \left[\widehat{a}_n^{\dagger}, \widehat{\rho}(t) \widehat{a}_m \right] \right)' \\ \widehat{\rho}(t)|_{t=0} = \widehat{\rho}_0, \end{cases}$$

$$(2)$$

где $\hat{a}_{m,n}$, $\hat{a}_{m,n}^{\dagger}$ - операторы уничтожения, рождения в модах *m* или *n*, операторы $\hat{\Omega}$ и $\hat{\Gamma}$ определяются частной и релаксационной матрицами:

$$\widehat{\Omega} = \sum_{n,m} \Omega_{nm} \widehat{a}_n^{\dagger} \widehat{a}_m, \quad \widehat{\Gamma} = \sum_{n,m} \Gamma_{nm} \widehat{a}_n^{\dagger} \widehat{a}_m, \quad (3)$$

$$\Omega = \begin{pmatrix} \Omega_0 + \Omega_1 & 0 \\ 0 & \Omega_0 - \Omega_1 \end{pmatrix}, \ \Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma_0 + \gamma \cos \theta & \gamma \sin \theta \\ \gamma \sin \theta & \Gamma_0 - \gamma \cos \theta \end{pmatrix}.$$
(4)

Таким образом, матрица Ω определяет компенсируемые поляризационные эффекты (без потери энергии), в частности, через Ω_0 определяется частота излучения, Ω_1 отвечает за двулучепреломление (дисперсию), тогда как матрица Г описывает диссипативные эффекты, а именно: Γ_0 определяет скорость термализации (уход из системы фотонов квантового состояния и приход в систему тепловых фотонов), $\Gamma_1 = \gamma \cos \theta$ отвечает за дихроизм, недиагональные элементы $\gamma \sin \theta$ определяют межмодовое взаимодействие, заключающееся в переходе части энергии из одной моды в другую.

Операторы Стокса в рассматриваемой нами модели имеют вид:

$$\hat{S}_{0} = \hat{a}_{1}^{\dagger}\hat{a}_{1} + \hat{a}_{2}^{\dagger}\hat{a}_{2}, \qquad \hat{S}_{1} = \hat{a}_{1}^{\dagger}\hat{a}_{1} - \hat{a}_{2}^{\dagger}\hat{a}_{2}, \qquad \hat{S}_{2} = \hat{a}_{1}^{\dagger}\hat{a}_{2} + \hat{a}_{2}^{\dagger}\hat{a}_{1}, \\
\hat{S}_{3} = -i(\hat{a}_{1}^{\dagger}\hat{a}_{2} - \hat{a}_{2}^{\dagger}\hat{a}_{1}).$$
(5)

Это эрмитовые операторы, имеющие действительные средние значения. Средние значения операторов (параметры Стокса) можно найти как:

$$\langle S_k(t) \rangle = \text{Tr}[\hat{S}_k \hat{\rho}(t)], \ k = 0, 1, 2, 3.$$
 (6)

Тогда степень поляризации D(t) может быть определена по аналогии с классическим случаем рассмотрения параметров Стокса:

$$D(t) = \frac{\sqrt{\langle S_1(t) \rangle^2 + \langle S_2(t) \rangle^2 + \langle S_3(t) \rangle^2}}{\langle S_0(t) \rangle}.$$
(7)

Т.е. поляризованное излучение определяется как D(t) = 1, частично поляризованное 0 < D(t) < 1.

Так, для нахождения временной эволюции параметров Стокса производилась подстановка операторов Стокса в уравнение Лиувилля, затем применялась операция взятия следа, упрощение и численное решение полученной системы уравнений.

3. Результаты

Численное моделирование полученных в ходе решения системы из уравнений Лиувилля для каждого оператора Стокса временных эволюций параметров Стокса производилось при значениях параметров: среднем числе тепловых фотонов $n_T = 10^{-6}$, амплитуде когерентного состояния $|\alpha|^2 = 0.5$. На рис. 1 приведена зависимость деполяризации от значения параметра θ , определяющего межмодовое взаимодействие. Было установлено, что характерный вид кривой деполяризации одинаков для трех случаев рассматриваемых состояний (сжатое вакуумное состояние, сжатое когерентное состояние или суперпозиция когерентных состояний в одной поляризационной моде и вакуумное состояние в другой поляризационной моде).





Рис. 1. Временная эволюция параметров Стокса

Использование выражения зависимости расстояния распространения от времени

$$e^{-\Gamma_0 t} = 10^{\frac{\alpha L}{10}}, \ L = \frac{ct}{\beta}$$
 (8)

для стандартного значения потерь $\alpha = -0.2$ дБ/км и константы распространения $\beta = 1.5$ позволило рассчитать скорость термализации $\Gamma_0 = 10$ кГц и расстояния распространения (км). Было получено, что увеличение скорости деполяризации для рассматриваемых состояний происходит в следующем порядке: сжатое когерентное состояние, сжатое вакуумное состояние, суперпозиция когерентных состояний, когерентное состояние, что показано на рис. 2.



Рис. 2. Зависимость расстояния распространения квантовых состояний от параметра θ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания №2019-0903.

- Berkelbach T. C., Thoss M. Special topic on dynamics of open quantum systems //J. Chem. Phys. 2020. V. 152. P. 020401.
- 2. Gorini V., Kossakowski A., Sudarshan E. C. G. Completely positive dynamical semigroups of N-level systems // Journal of Mathematical Physics. 1976. V. 17. No. 5. P. 821–825.
- 3. Lindblad G. On the generators of quantum dynamical semigroups // Communications in Mathematical Physics. 1976. V. 48. №. 2. P. 119–130.
- 4. Gaidash A., Kozubov A., Miroshnichenko G. Dissipative dynamics of quantum states in the fiber channel // Physical Review A. 2020. V. 102. №. 2. P. 023711.
- 5. Goldberg A.Z. et al. Quantum concepts in optical polarization //Advances in Optics and Photonics. 2021. V. 13. №. 1. P. 1–73.
- 6. Gaidash A. et al. The Influence of Signal Polarization on Quantum Bit Error Rate for Subcarrier Wave Quantum Key Distribution Protocol // Entropy. 2020. V. 22. №. 12. P. 1393.
- 7. Gaidash A. et al. Quantum dynamics of mixed polarization states: effects of environmentmediated intermode coupling // JOSA B. 2021. V. 38. №. 9. P. 2603–2611.
- 8. Scully M.O., Zubairy M.S. Quantum optics. Cambridge University Press, 1999.

ОДНОИМПУЛЬСНОЕ И ЗАПЕРТОЕ ЭКСИТОННОЕ ЭХО В АНСАМБЛЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe/CdS/ZnS

В.В. Самарцев, , Т.Г. Митрофанова

Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН, Казань 420029, ул. Сибирский тракт, д.10/7 e-mail: dr_samartsev39@mail.ru

1. Введение

Данная работа посвящена теоретическому анализу возможности возбуждения экситонного эха [1] в одноимпульсном и запертом режимах воздействия трапециевидными лазерными импульсами на ансамбль полупроводниковых квантовых точек (ПКТ) CdSe/CdS/ZnS, синтезированных экспериментальной группой из Института спектроскопии PAH (MockBa, Tpouцk). В работе [2] сообщалось о наблюдении некогерентного фотонного эха (НФЭ) в тонком слое вышеуказанных коллоидных ПКТ размером 3-7 нм. При таких размерах ПКТ уподобляются по своим свойствам атомам и имеют дискретный набор энергетических состояний. С другой стороны, размеры таких ПКТ фактически совпадают с размерами экситонов Ванье-Мотта [3, 4]. По существу, первой задачей авторов данной работы стал теоретический поиск ответа на вопрос: не является ли экспериментально наблюдавшееся в работе [2] НФЭ экситонным эхом? Вторая задача состояла в исследовании особенностей одноимпульсного и запертого режимов возбуждения некогерентного экситонного эха (НЭЭ).

Напомним, что первые экспериментальные работы по наблюдению НФЭ относятся к 1984 году [5, 6]. В России метод некогерентного фотонного эха целенаправленно развивался Ю.Г. Вайнером [7] из Института спектроскопии РАН (см. также монографию [8] с подробным описанием метода). При проведении исследований Ю.Г. Вайнер справедливо утверждал, что временное разрешение метода фотонного эха (ФЭ) определяется не длительностью возбуждающих оптических импульсов Δt , а временем когерентности излучения τ_c – величиной, обратно пропорциональной ширине спектра этих импульсов. Поэтому при использовании широкополосного оптического источника, время когерентности которого меньше длительности импульса, временное разрешение метода ФЭ может достигать фемтосекундного диапазона. Так, Вайнером с коллегами в работах [9, 10] было экспериментально показано, что при очень широкополосном («шумовом») импульсном источнике (с шириной спектра в сотни см⁻¹) удаётся получать временное разрешение около десятка фемтосекунд при длительности «шумового» импульса 15 нс без использования дорогостоящей фемтосекундной техники. В монографии [8] указано, что в качестве «шумовых» источников авторы экспериментов [9, 10] использовали лазеры на красителях.

2. Физика одноимпульсного и запертого экситонного эха

В оптическом диапазоне времена необратимых релаксаций ПКТ лежат в пикосекундном и даже фемтосекундном диапазонах. Это обстоятельство накладывает жёсткие ограничения на межимпульсные временные интервалы при формировании экситонного эха (ЭЭ). Представляется важным приблизить условия возбуждения ЭЭ к условиям возбуждения другого когерентного явления – экситонной самоиндуцированной прозрачности [11]. Для этого был применён при возбуждении ЭЭ метод одноимпульсного эха [12], ранее реализованный Блумом в радиочастотном диапазоне. В этом методе в качестве возбуждающих импульсов используются фронты единственного когерентного возбуждающего сигнала, а в качестве интервала между ними выступает сам протяжённый сигнал. Дело в том, что фронты этого единственного возбуждающего сигнала трапециевидной формы имеют другой Фурье-спектр нежели спектр протяжённой части сигнала. Передний и задний фронты единственного трапециевидного сигнала, в отличие от его протяжённой части, возбуждают другие участки неоднородно-уширенной спектральной линии. Возбуждение ЭЭ возможно на электродипольных переходах ПКТ между вакуумным (0) и невырожденным возбуждённым (f] состояниями, а причиной расфазировки будет служить нелинейность, обязанная небозонным коммутационным отношениям операторов рождения и уничтожения экситонов. Такой режим возбуждения одноимпульсного ЭЭ уже рассматривался в работе [13]. Удельная поляризация ансамбля ПКТ, как показано в [13], может быть представлена в виде:

$$\langle P(t) \rangle \sim \left\{ A e^{-i\vec{\varkappa}\vec{n} + i\Delta\omega_{\vec{\varkappa}}(t-\Delta t)} B_{\vec{\varkappa}}^{+} + A^{*} e^{i\vec{\varkappa}\vec{n} - i\Delta\omega_{\vec{\varkappa}}(t-\Delta t)} B_{\vec{\varkappa}} \right\},\tag{1}$$

где $A = i \left[t - 2 \frac{|b|^2}{a^2} \cos \varphi + \frac{a}{\varphi} \sin \varphi \right]$, $a = \Delta \omega_{\vec{\varkappa}} \Delta t$, $b = \frac{\theta}{2} e^{-i\vec{\varkappa}\vec{n}}$, $\varphi = \left[\theta^2 + \Delta \omega_{\vec{\varkappa}}^2 \Delta t^2 \right]^{1/2}$, θ – импульсная «площадь», $\Delta \omega_{\vec{\varkappa}} = \hbar^{-1} E_{\vec{k}} - \omega$, $E_{\vec{k}}$ – энергия экситона с волновым вектором \vec{k} , \vec{n} – вектор решётки, Δt – длительность импульса, $\vec{\varkappa}$ – волновой вектор единственного лазерного импульса. При выполнении характерного для одноимпульсного эха условия $\Delta \omega_{\vec{\varkappa}}^2 \Delta t^2 \gg \theta^2$ имеем:

$$\langle P(t) \rangle \sim i \vec{d}_f \sin(t - 2\Delta t) \left\{ B_{\vec{\varkappa}}^+ e^{-i\vec{\varkappa}\vec{n}} + B_{\vec{\varkappa}} e^{i\vec{\varkappa}\vec{n}} \right\},\tag{2}$$

(где \vec{d}_f – электрический дипольный момент перехода), т.е. возможно формирование одноимпульсного экситонного эха в момент времени $t = 2\Delta t$ в направлении $\vec{k} = \vec{\varkappa}$. Анализ показал, что выполнение условия $\Delta \omega_{\vec{\varkappa}}^2 \Delta t^2 \gg \theta$, скорее всего, связано со вторым и последующими максимумами спектра возбуждающего лазерного импульса.

Теперь приступим к обсуждению режима запертого эха. В отличие от предыдущего случая, режим запертого эха является двухимпульсным. Для его реализации, наряду с коротким первым лазерным импульсом, требуются оба фронта второго трапециевидного протяжённого импульса. Можно провести аналогию с сигналом стимулированного фотонного эха в трёхимпульсном режиме возбуждения, когда на интервал времени между вторым и третьим возбуждающими импульсами накладывается ограничение временем продольной релаксации T_1 , а не временем фазовой релаксации T_2 , как на другие временные интервалы. В режиме запертого эха роль этого интервала выполняет второй протяжённый импульс, фронты которого играют роль второго и третьего возбуждающих импульсов. Сигнал запертого фотонного эха был наблюдён в 1973 году П. Лиао и С. Хартманном [14]. Заметим, что в 1979 году авторы теоретической работы [15] предложили использовать этот режим в оптической эхо-спектроскопии примесных кристаллов в режиме двойных резонансов. В данной работе мы анализируем возможности экситонного аналога запертого фотонного эха для изучения ПКТ типа CdSe/CdS/ZnS. Также, как в одноимпульсном режиме, предположим $\Delta\omega\Delta t_2 \gg \theta_2$ (где $\Delta\omega$ – параметр расстройки, а индекс «2» относится к запирающему импульсу). Имея в виду, что $\Delta t_1 \ll \Delta t_2$, получаем, что среднее значение удельной поляризации (P(t)) пропорционально F(t), где

$$F(t) = i \frac{\theta_1 \theta_2^2}{2\Delta t_1 \Delta t_2^2} \int_{-\infty}^{\infty} d(\Delta \omega) g(\Delta \omega) \left\{ \frac{1}{\Delta \omega^2} \left[\sin(t - 2\tau - \Delta t_2) \Delta \omega - 2\sin(t - 2\tau - 2\Delta t_2) \Delta \omega - i\sin(t - 2\tau + 2\Delta t_2) \Delta \omega \right] \right\} \cdot \sum_j e^{i(2\vec{k}_2 - \vec{k}_1 - \vec{k}_3)\vec{r}_j} ,$$
(3)

где первый член в фигурной скобке соответствует запертому экситонному эхо, которое генерируется в момент времени $t = 2\tau + \Delta t_2$. Второй и третий члены соответствуют сигналу фотонного эха в момент времени $2(\tau + \Delta t_2)$. Оба сигнала излучаются в направлении $\vec{k}_3 = 2\vec{k}_2 - \vec{k}_1$.

3. Заключение

Таким образом, нами показана возможность возбуждения экситонных аналогов явлений одноимпульсного и запертого эха для последующего их использования в эхо-спектроскопии ПКТ типа CdSe/CdS/ZnS. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-02-00545-а.

- 1. Гадомский О.Н., Самарцев В.В. Экситонные индукция и эхо // ФТТ. 1971. Т. 13. С. 2806–2808.
- Каримуллин К.Р., Аржанов А.И., Наумов А.В. Двухимпульсное некогерентное фотонное эхо в тонком слое квантовых точек CdSe/CdS/ZnS при криогенной температуре // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 11. С. 1620–1623.
- 3. Грибковский В.П. Полупроводниковые лазеры. Минск: изд. Университетское, 1988. 304 с.
- 4. Самарцев В.В., Камалова Д.И., Митрофанова Т.Г. Теоретическое исследование возможности создания квантового вентиля и экситонной когерентности на полупроводниковых квантовых точках // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 12. С. 1738–1742.
- 5. Beach R., Hartmann S.R. Incoherent photon echo // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 57. P. 663–666.
- 6. Asaka S., Nakatsuka H., Fujiwara M., Matsuoka M. Accumulated photon echoes with incoherent light in Nd3+ doped silicate glass // Phys. Rev. A. 1984. V. 29. P. 2286–2289.
- 7. Вайнер Ю.Г. Динамика полупроводниковых молекулярных твердотельных сред, исследованная методами фотонного эха и спектроскопии одиночных молекул: дисс. д-ра физ.мат. наук. Троицк МО, 2005.
- 8. Самарцев В.В., Никифоров В.Г. Фемтосекундная лазерная спектроскопия. М.: Тровант, 2017. 401 с.
- 9. Вайнер Ю.Г., Груздев Н.В. Динамика органических аморфных сред при низких температурах // Оптика и спектр. 1994. Т. 76. № 2. С. 252–258.
- Каримуллин К.Р., Вайнер Ю.Г., Ерёмчев И.Ю., Наумов А.В., Самарцев В.В. Сверхбыстрая оптическая дефазировка в примесном полиметилметакрилате: исследования методом некогерентного фотонного эха с фемтосекундным временным разрешением // Уч. зап. КГУ. Физ.-мат. науки. 2008. Т. 150. Кн. 2. С. 148–159.

- 11. Брюкнер Ф., Васильев Я.Т., Днепровский В.С., Кощуг Д.Г., Силина Е.К., Хаттатов В.У. Самоиндуцированная прозрачность в полупроводнике // ЖЭТФ. 1974. Т. 67. С. 2219–2226.
- 12. Bloom A.L. Nuclear induction in inhomogeneous fields // Phys.Rev. 1955. V. 98. P. 1105–1107.
- Самарцев В.В., Сиразиев А.И., Трайбер А.С. Экситон-эхо в одноимпульсном режиме возбуждения // ФТТ. 1978. Т. 20. № 10. С. 3169–3171.
- Liao P.F., Hartmann S.R. Radiation locked photon echoes and optical free induction in ruby // Phys. Lett. A. 1973. V. 44. P. 361–362.
- 15. Самарцев В.В., Кавеева З.М., Трайбер А.С., Хадыев И.Х. «Запертое» световое эхо в режиме двойных резонансов // Оптика и спектр. 1979. Т. 46. С. 608–609.

ХИМИЧЕСКАЯ ДИАГНОСТИКА НАНОРАЗМЕРНЫХ АМОРФНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПОКРЫТИЙ С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОАССИСТИРУЕМОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

С.В. Сапарина, С.С. Харинцев

Казанский федеральный университет, Институт физики, 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 16a e-mail: <u>sveta.saparina@yandex.ru</u>

1. Введение

Ультратонкие пленки из аморфного углерода, а также композитные материалы на их основе нашли широкое применение в высокочувствительных сенсорах, наноэлектронике, оптоволоконных системах зондирования в нефтегазовой промышленности [1]. Однако важной проблемой, ограничивающей их повсеместное использование, является присущая материалу химическая неоднородность и структурная нестабильность при эксплуатации в условиях повышенных температур и давлений. В частности, в таких условиях герметичные свойства углеродных покрытий могут ухудшаться, что приводит к росту оптических потерь и неэффективности работы электронного устройства на основе таких материалов в целом. Поэтому на сегодняшний день становится актуальной задача по исследованию химических и морфологических свойств аморфных углеродных пленок с температурой.

Целью настоящей работы является наноспектроскопический анализ неупорядоченных проводящих покрытий. В настоящей работе мы демонстрируем возможности когерентной спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света для разрешения дефектных полос спектров комбинационного рассеяния света аморфных углеродных покрытий.

Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР) является мощным аналитическим инструментом для наноразмерной химической визуализации [2] и детектирования одиночных молекул [3]. Еще одна особенность комбинационного рассеяния света в ближнем поле – это возможность измерения фононных корреляций в поликристаллических и некристаллических твердых телах. Известно, что увеличение интенсивности ближнего поля масштабируется как степенная функция расстояния между зондом и образцом, как $I_{\rm гкp} \sim (h + r_0)^{-l}$, где h – расстояние зонд-образец, r_0 – радиус кривизны зонда. Для совершенных 0Д, 1Д и 2Д наносистем показатель l равен 12, 11, 10 (режим некогерентного рассеяния) и 12, 10, 8 (режим когерентного рассеяния) соответственно [4]. Пространственная когерентность критически зависит от размерности и симметрии рассеивающего объекта. Ранее было обнаружено, что длина когерентности для оптических фононов в углеродной нанотрубке и графене составляет 10 нм и 30 нм, соответственно [5]. Короткодействующее оптическое ближнее поле, создаваемое антенной с радиусом кривизны 20 нм на расстоянии 10 нм от образца, имеет пространственную локализацию 20 нм.

Таким образом, мы можем сделать вывод, что с помощью ближнего поля можно детектировать когерентные фононы морфного углерода.

2. Экспериментальная часть

В качестве исследуемых образцов мы использовали оптическое волокно с диаметром 125 мкм, покрытое углеродным слоем толщиной 31 нм. Углеродное покрытие наносили химическим осаждением из паров газа-реагента – пропилена. Спектры комбинационного рассеяния регистрировали с использованием линейно поляризованного света с длиной волны 632.8 нм. Мощность лазера, использованная в наших спектроскопических экспериментах, составляла около 1 мВт/см². Спектры комбинационного рассеяния регистрировались в спектральной области 150-2000 см⁻¹. Время выдержки составило 30 секунд. Золотые иглы для измерений ГКР были изготовлены с помощью электрохимического травления. Представляющий интерес образец подвергался воздействию лазерного луча с длиной волны 632.8 нм и интенсивностью 1 кВт/см². Золотая игла совершала практически вертикальные колебания на расстоянии 5-10 нм над образцом. Карты ГКР размером 64х64 пикселя были получены путем сканирования с шагом 30 нм и временем экспозиции 0.3 с на пиксель и собраны с помощью камеры ЕМССD, охлажденной до -96 °C.

3. Результаты и выводы

На рис. 1 (а) показано изображение поверхности аморфного углеродного покрытия толщиной 31 нм. Видно, что образец имеет неоднородную поверхность с большим количеством неупорядоченных наноразмерных доменов. Средний латеральный размер квазиграфитовых доменов составляет 20-40 нм. Каждый из них представляет собой стопку sp²-листов графена, содержащих большое количество дефектов. Квазиграфитовые домены содержат интеркалированную воду между дефектными sp²-слоями и некоторое количество воды, прикрепленной к краевым/внутренним дефектам посредством водородных связей [6].



Рис. 1. (а) АСМ-изображение углеродного покрытия толщиной 31 нм; (б) Схема экспериментальной установки для исследования когерентного гигантского комбинационного рассеяния света оптических волокон с углеродным покрытием волокон, нагреваемых электрическим током

На рис. 1 (б) показана схема нашей экспериментальной установки, в которой электрически нагретое оптическое волокно с углеродным покрытием подвергается воздействию сильно сжатого лазерного излучения, создаваемого изогнутым золотым зондом. Это доказывает, что электронагрев приводит к неоднородному нагреву поверхности за счет эффектов перколяции. Электронагрев аморфных углеродных покрытий позволяет активировать в горячих точках зависящие от температуры химические реакции, например, расширение sp²-графитоподобных кристаллов, возникающее при температурах выше 400 °C [7]. По мере того, как достигаются более высокие температуры за счет электрического нагрева, количество связанных с водой гидроксильных групп уменьшается, и только гидроксильные группы, не содержащие воды, вносят вклад в спектры. Под воздействием падающего света с глубиной субволновой длины становится возможным получить когерентный отклик ГКР.

Таким образом, широкие дефектные полосы первого порядка могут быть спектрально разрешены из-за увеличения длины фононной когерентности.

На рис. 2 (а) показаны ГКР-спектры аморфного углеродного покрытия, толщиной 31 нм, при различных значениях приложенного напряжения. Эти спектры были взяты из области, отмеченной пунктирным квадратом на рис. 2(6)-(г). Как и следовало ожидать, локальный электронагрев приводит к увеличению интенсивности D^{\pm} полос, что согласуется с появлением безводных гидроксильных групп.



Рис. 2. (а) ГКР-спектры аморфного углеродного покрытия толщиной 31 нм при разных значениях приложенного напряжения, снятые в различных точках покрытия, пронумерованные от 1 до 5, которые показаны на рис. 2 (б)-(г); ГКР-карты аморфного углеродного покрытия толщиной 31 нм при приложении напряжения: 3 В (б), 7 В (в), 9 В (г)

С другой стороны, наблюдаемые D^{\pm} полосы сужаются за счет расширения бездефектных sp² областей, следовательно, можно получить режим когерентный отклик ГКР. Для тех участков на рис. 2(б)-(г), где интенсивность ГКР остается неизменной при увеличении напряжения смещения, мы заключаем, что рассеянный свет некогерентный, в случае усиления ин-

тенсивности ГКР мы наблюдаем когерентный свет. Красный сдвиг *G* полосы до 1555 см⁻¹ связан с повышенным содержанием аморфной фазы, а не расширением sp² углеродных доменов. Горячие точки на картах ГКР, снятые на 1260 см⁻¹, выделены цифрами от 1 до 5 на рис. 2(б)-(г). Поскольку при электронагреве некоторые из функционализированных дефектных участков становятся обедненными водой, то их относительные интенсивности увеличиваются, что наблюдается на картах ГКР (рис. 2 (б)-(г)).

Таким образом, более высокое спектральное разрешение было достигнуто за счет режима когерентного рассеяния, которому способствует расширение sp²-доменов при локальном электронагреве. С практической точки зрения, метод ГКР с электронагревом образца позволяет оценить степень кристалличности углеродистых материалов с более высокой спектральной точностью, что не требует математической обработки. Наконец, этот метод открывает новые возможности для наноразмерной химической визуализации неупорядоченных проводящих материалов. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № <u>20-32-90086</u>.

- 1. Lemaire P.J., Lindholm E.A. Specialty Optical Fibers Handbook. Burlington: Elsevier Academic Press, 2007. P. 453–490.
- 2. Shi X., et. al. Advances in tip-enhanced near-field Raman microscopy using nanoantennas // Chem. Rev. 2017. V. 117. P. 4945–4960.
- Zhang R., et. al. Chemical mapping of a single molecule by plasmon-enhanced Raman scattering // Nature. 2013. V. 498. P. 82–86.
- 4. Maximiano R.V., et. al. Mechanism of near-field Raman enhancement in two-dimensional systems // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 235434.
- 5. Novotny L. From near-field optics to optical antennas // Phys. Today. 2011. V. 64. P. 47–52.
- 6. Kharintsev S.S., Saparina S.V., Stolov A.A., Li J., Fishman A.I. Water Enrichment/Depletion of Amorphous Carbon Coatings Probed by Temperature-Dependent Dc Electrical Conductivity and Raman Scattering // J. Appl. Surf. Sci. 2021. V.4. P. 1–10.

ОПТИМИЗАЦИЯ КОНТРОЛИРУЮЩЕГО ПОЛЯ ДЛЯ БЫСТРОЙ КВАНТОВОЙ ПАМЯТИ В ИНТЕГРАЛЬНОЙ ВОЛНОВОДНО- РЕЗОНАТОРНОЙ СХЕМЕ

Ю.А. Харламова, Н.М. Арсланов, С.А. Моисеев

Казанский квантовый центр, Казанский национальный исследовательский университет имени А.Н. Туполева 420126, Казань, ул. Четаева 18а e-mail: samoi@yandex.ru

1. Введение

Быстрые манипуляции с фотонными кубитами в интегральных волноводно-резонаторных системах являются необходимыми в работе ряда устройств практической квантовой информатики. В последнее время большее внимание привлекают режимы сохранения фотонного кубита в атоме, расположенном в резонаторе, которые реализуются в условиях быстрого неадиабатического взаимодействия фотона с атомом [1-3], которое способствует значительному ускорению квантовых операций и ослабляет негативное влияние процессов релаксации. Реализация высокой эффективности в таких режимах сохранения фотонных кубитов остается нерешенной проблемой [1-4]. Контролируемый перенос фотонного волнового пакета в атом за счет рамановского перехода атома на долгоживущий незаселенный уровень благодаря выбору оптимальной временной формы управляющего лазерного импульса может повысить эффективность памяти близко к 100% [5]. Однако форма включения контролирующего поля может значительно изменять эффективность быстрой квантовой памяти. В данной работе мы оптимизируем форму контролирующего поля с учетом плавного включения для протокола быстрой квантовой памяти [5] в интегрально волноводно-резонаторной схеме.

2. Принципиальная схема квантовой памяти и основные уравнения

Для неадиабатического взаимодействия фотона с атомом в высокодобротном резонаторе общий гамильтониан системы описывается как:

$$H = H_a + H_c + H_f + V_{a\Omega} + V_{ac} + V_{fc},\tag{1}$$

где $H_a = \sum_{m=2}^{3} \hbar \omega_{a1} \hat{P}_{mm}$ – гамильтониан трехуровневого атома (ω_{a1} – частота атомного перехода $|1\rangle \leftrightarrow |m\rangle$), $H_c = \hbar \omega_c \hat{a}_c^+ \hat{a}_c$ – гамильтониан резонатора (ω_c – частота резонатора), $H_f = \int_0^\infty df \ \hbar \, \omega \hat{a}_f^+ \hat{a}_f$ – гамильтониан волноводной моды, $V_{a\Omega} = \hbar \{\Omega_0(t) \hat{P}_{32} e^{i[\omega_\Omega t + \varphi(t)]} + h. c.\}$ – гамильтониан взаимодействия атома с контролирующим лазерным полем, характеризующимся частотой Раби $\Omega_0(t)$ и фазой $\varphi(t)$ поля, связывающего атомные состояния $|2\rangle$ и $|3\rangle$, $V_{ac} = \hbar g(\hat{a}_c \hat{P}_{31} + \hat{a}_c^+ \hat{P}_{13})$ – гамильтониан взаимодействия атома и резонатора (g – константа связи взаимодействий атом-мода резонатора) и $V_{fc} = \hbar \int_0^\infty df (g_{cf} \hat{a}_f^+ \hat{a}_c + h. c)$ – гамильтониан связи между модой резонатора и волноводными модами, где g_{cf} – константа взаимодействия моды резонатора и волноводной моды. Поведение исследуемой квантовой системы описывается волновой функцией:

$$|\psi(t)\rangle = \left\{a_c(t)\hat{a}_c^+ + b(t)\hat{P}_{21} + S(t)\hat{P}_{31} + \int d\omega f_\omega(t)\hat{a}_\omega^+\right\}|1\rangle \otimes |\emptyset\rangle$$
(2)

Предполагается, что однофотонный волновой пакет передается через волновод в высокодобротный резонатор, содержащий трехуровневый атом, находящийся в основном состоянии $|1\rangle$ (рис.1) так, что $\int d\omega |f_{\omega}(t \to -\infty)|^2 = 1$ с начальными амплитудами $a_c(t \to -\infty) = S(t \to -\infty) = b(t \to -\infty) = 0$, учитывая, что получаем уравнения для этих амплитуд:

$$\frac{d}{dt}S = -(i\Delta_s + \gamma_s)S - i\Omega_0(t)e^{-i\varphi(t)}b - iga_c,$$
(3)

$$\frac{d}{dt}b = -(i\Delta_b + \gamma_b)b - i\Omega_0(t)e^{i\varphi(t)}S,$$
(4)

$$\frac{d}{dt}a_c = -\left(i\Delta_c + \frac{\kappa}{2}\right)a_c - igS + \sqrt{\kappa}a_{in},\tag{5}$$

где реализован переход к медленным переменным: $a_c = a_c(t)e^{i\omega_l t}$, $S = S(t)e^{i\omega_l t}$, $b = b(t)e^{i(\omega_\Omega - \omega_l)t}$, $a_{in} = a_{in}(t)e^{i\omega_l t} = -i\frac{g_{cw}}{\sqrt{\kappa}}e^{i\omega_l t}\int d\omega f_{\omega}(t_0)e^{i\omega(t-t_0)}$, $\int dt a_{in}(t)a_{in}^*(t) = 1$, $\kappa = 2\pi |g_{cw}|^2$, $\Delta_s = \omega_{31} - \omega_l$, $\Delta_b = (\omega_{21} + \omega_\Omega - \omega_l)$, $\Delta_s = \omega_c - \omega_l$, $\Omega_0(t)$ – частота Раби, $\varphi(t)$ – фаза управления лазерным полем, связывающим атомные состояния |2) и |3), для более общего анализа также вводятся феноменологические константы атомного затухания γ_s , γ_b .



Рис. 1. Принципиальная схема протокола быстрой квантовой памяти: управляющее поле Ω₀ и фотонный волновой пакет *f* распространяются по волноводу и взаимодействуют с атомом через моду резонатора *a_c*. Управляющее поле Ω₀ обеспечивает перевод оптического возбуждения атома на его долгоживущее состояние |2). На вставке показаны атомные состояния и квантовые переходы

Входной импульс представляет собой импульс гауссовой формы: $a_{in}(t) = \sqrt{\frac{\Delta_f}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{(\Delta_f t)^2}{2}}$

, где Δ_f - спектральная ширина волнового пакета сигнального фотона). При решении дифференциального уравнения первого порядка для частоты Раби $\Omega_0(t)$, полученного из системы уравнений (3)-(5) для случая незначительной слабой релаксации $\gamma_{s,b}t \ll 1$ и точных резонансов $\Delta_{s,b,c} = 0$ находим решения для частоты Раби и населенности долгоживущего уровня:

$$\Omega_{0}(t) = \frac{2g^{2} + \Delta_{f}^{2}(-2 + \kappa t + 2\Delta_{f}^{2}t^{2})}{\sqrt{\left(c + \frac{2\sqrt{\pi}g^{2}\kappa}{\Delta_{f}}Erf(\Delta_{f}t)\right)}e^{\Delta_{f}^{2}t^{2}} - 4g^{2} - \left(\kappa + 2\Delta_{f}^{2}t\right)^{2}}}$$
(6)
$$|b(t)|^{2} = \frac{\left(2g^{2}a_{c}(t) + \kappa a_{c}'(t) - 2\sqrt{\kappa}a_{in}'(t) + 2a_{c}''(t)\right)^{2}}{4g^{2}\Omega_{0}(t)^{2}},$$
(7)

где $c = 2\sqrt{\pi}g^2\kappa/\Delta_f$ определяется из начального условия $|b(-\infty)|^2 = 0$.

3. Параметры оптимизации контролирующего поля

Условия согласования рассматриваемого протокола памяти справедливы только при определенных параметрах взаимодействия, которые обеспечивают оптимальное сохранение входного фотонного состояния в долгоживущее атомное состояние. Аналитическое поведение управляющего лазерного поля для некоторых параметров может иметь сложное поведение и начинаться с очень больших значений, что неэффективно для использования в реальных экспериментальных схемах, в то время как фотонный кубит еще даже не вошел в систему. Поэтому в реальных условиях управляющее лазерное поле $\Omega(t) = F(t)\Omega_0(t)$ можно включать постепенно, начиная с малых значений, которые можно учесть, введя функцию включения,

которую мы примем как $F(t) = \sqrt{1/2 + 1/2} \operatorname{Erf} \left(\Delta_{f^2}(t - t_2) \right)$, где Δ_{f^2}, t_2 – ширина и время включения передаточной функции соответственно. Использование функции включения может снизить эффективность сохранения фотонов на долгоживущем уровне атома. На рис.2 показаны разное время включения функции включения для эффективности переноса фотонного кубита на долгоживущий уровень атома в резонаторе.



Рис.2. Поведение внешнего управляющего поля $\Omega(t)$ и $|b(t)|^2$ в зависимости от времени $t \in (t_0, t_1)$ при $\Delta_f = 0.529, \kappa = 3.35, g = 1, \Delta_{f2} = 3$ и разное время включения t_2 :

1) $t_2 = -5$, $\Omega^{(1)}$ – черная пунктирная линия, $|b^{(1)}(t_1)|^2 = 0.9997$, 2) $t_2 = -4$, $\Omega^{(2)}$ – оранжевая 2) линия, $|b^{(2)}(t_1)|^2 = 0.9996$, 3) $t_2 = -3$, $\Omega^{(3)}$ – зеленая линия, $|b^{(3)}(t_1)|^2 = 0.9995$, 4) $t_2 = -2$, $\Omega^{(4)}$ – красная линия, $|b^{(4)}(t_1)|^2 = 0.9980$, 5) $t_2 = -1$, $\Omega^{(5)}$ – синяя пунктирная линия, $|b^{(5)}(t_1)|^2 = 0.9735$.

Отметим, что решение (7) с учетом $|S(t \to \infty)|^2 \to 0, |a_c(t \to \infty)|^2 \to 0$ дает $|b(t)|^2 + |S(t)|^2 + |a_c(t)|^2 = \frac{1}{2} (1 + Erf(\Delta_f t))$ для полной вероятности получить возбуждение в моде атом + резонатор. Таким образом, мы получаем $|b(t \to \infty)|^2 \to 1$, что показывает эффективное сохранение фотонов в долгоживущем атомном состоянии $|2\rangle$ к концу взаимодействия (рис. 2).



Рис.3. Поведение системы: входящего поля $a_{in}^2(t)$ (оранжевая линия), поля в резонаторе $|a_c(t)|^2$ (фиолетовая линия), управляющее поле $\Omega(t)$ (черная пунктирная линия), возбужденная мода $|S(t)|^2$ состояния |3) атома (красная линия), возбужденная мода $|b(t)|^2$ долгоживущего уровня атома (синяя линия) и вероятность возбуждения системы атом+резонатор $|b(t)|^2 + |S(t)|^2 + |a_c(t)|^2$ (зеленая пунктирная линия). Параметры: $\Delta_f = 0.529, \kappa = 3.35, g = 1, \Delta_{f2} = 3, t_2 = -3$

Сохранение фотона происходит в асимптотическом режиме с плавным затуханием во времени управляющего поля (рис. 3). Временное поведение частоты Раби обеспечивает необходимую зависящую от времени силу взаимодействия атома с фотоном и относительную фазу между возбужденным дипольным моментом атома и модой поля резонатора. Оба эти фактора делают возможным однонаправленную передачу сигнала фотонного волнового пакета на атомные состояния из волновода без его отражения от резонатора.

Заключение

Предложена оптимальная форма включения контролирующего поля для быстрого и эффективного сохранения одиночного фотона на долгоживущем уровне трехуровневого атома в высокодобротном резонаторе с использованием неадиабатического протокола квантовой памяти. Физические условия и временные свойства такого переноса изучались путем анализа найденного аналитического решения для волнового пакета фотона с гауссовой временной модой. Оптимизирована форма управляющего поля, найдены его оптимальные параметры, не влияющие на эффективность сохранения.

Работа выполнена в рамках госзадания – соглашение № 02.03.2020 №00075-02-2020-051/1 реестр №78 КБК 01104730290059611.

- 1. Giannelli L., Schmit T., Calarco T. et al. // New J. Phys. 2018. V. 20. P. 105009.
- 2. Morin O. et al. // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 123. P. 133602.
- 3. Macha T., Urunuela E., Alt W. et al // Phys. Rev. A. 2020. V 101. P. 053406.
- 4. Dilley J., Nisbet-Jones P., W. Shore B., and Kuhn A. // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. P. 023834.
- 5. Arslanov N.M., Moiseev S.A. // Journal of Russian Laser Research. 2021. V. 42. P. 378–387.

ОПТИЧЕСКОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ СТЕКЛОВАНИЯ ТОНКОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ПЛЕНКИ ПММА С ПОМОЩЬЮ ТЕРМОПЛАЗМОННОЙ МЕТАПОВЕРХНОСТИ

Е.А. Черных, С.С. Харинцев

Казанский федеральный университет, Институт физики, 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 16а e-mail: elenorchernykh@gmail.com

1. Введение

Локализованное тепловыделение с помощью оптически возбуждаемых плазмонных наночастиц в настоящее время является активной областью исследований. При оптическом освещении в условиях плазмонного резонанса наночастицы металлов могут играть роль эффективных наноисточников тепла. Этот эффект стал основой для развития новой области термоплазмоники и конкретно таких ее приложений, как фототермическая терапия рака [1], высвобождение лекарств [2], нанохирургия [3], нанотермометры [4], термофотовольтаика [5], нанохимия [6]. Традиционно благородные металлы, такие как золото и серебро были предпочтительными материалами для демонстрации различных термоплазмонных явлений. Однако низкие температуры плавления препятствуют их реализации на практике в технологически важных высокотемпературных приложениях. Нитрид титана (TiN) стал многообещающим альтернативным плазмонным материалом из-за его тугоплавких свойств (температура плавления 2930 °С), химической стабильности и хорошей проводимости. Кроме того, TiN является биосовместимым среди многих других плазмонных материалов. Благодаря плазмонным наноструктурам возможно создание локализованного тепла в объеме размером нескольких нанометров с изменением температуры на сотни градусов Цельсия с помощью лазерного освещения, в то время как температура всего образца и окружающей среды остаются неизменной. Это может найти применение при локальном исследовании фазовых переходов в полимерных и жидкокристаллических системах, а также многофазных смесях, гетерогенных тонких пленках и пространственно-ограниченных структурах, которые на сегодняшний день являются элементной базой фотонных и оптоэлектронных устройств.

В связи с этим мы представляем исследование управляемого локального фотонагрева плазмонных наноструктур термоплазмонной метаповерхности из нитрида титана и оптического детектирования температуры стеклования тонкой полимерной пленки из полиметилметакрилата (ПММА) толщиной 100 нм с использованием термоплазмонной метаповерхности.

2. Моделирование

Тугоплавкая плазмонная метаповерхность представляет собой массив наноструктур из нитрида титана TiN квадратной формы размером 200х200 нм², расположенных на кремниевой (Si) подложке (рис. 1a). Тонкая полимерная пленка ПММА толщиной 100 нм наносилась на метаповерхность методом центрифугирования (рис.1б), при этом ее толщина была определена

с помощью атомно-силовой микроскопии в режиме литографии. Метаповерхность освещалась лазерным излучением с длиной волны 633 нм и апертурой N.A. = 0.9, при этом локальное тепловыделение было обусловлено мощностью накачки и ее изменением до 16 мВт, что соответствует интенсивности 5 МВт/см².



Рис. 1. (а) Схема плазмонной метаповерхности из массива TiN наноструктур на кремниевой подложке; (б) Схема плазмонной метаповерхности, покрытой тонкой пленкой ПММА

Моделирование стационарного распространения тепла проводилось с помощью численного моделирования с использованием программы Lumerical FEM. Предварительно методом конечных разностей во временной области (FDTD) была рассчитана мощность, поглощаемая наноструктурой из нитрида титана при ее освещении. Карты плотности поглощенной мощности демонстрируют большое поглощение в случае, когда наноструктура покрыта полимерной пленкой ПММА, как показано на рис. 2 (а, б), хотя приращение температуры значительно ниже, чем в случае воздушной среды. Это связано с повышенной теплопроводностью ПММА. Максимальная температура нагрева наноструктуры в воздушной среде составила 637 К, в то время как в случае, когда наноструктура покрыта полимером, максимальная температура составила 483 К (рис. 2 (в, г)). Этого нагрева достаточно для достижения стеклования полимера ПММА, температура стеклования которого $T_g = 383$ К. Более высокие температуры нагрева полимера могут быть получены за счет увеличения мощности лазерного излучения.



Рис. 2. Моделирование методом FDTD / FEM (a,б) плотности поглощенной мощности (в,г) и температурные карты вокруг наноструктуры из нитрида титанаTiN, покрытого воздухом/полимером ПММА

Мощность света, поглощаемая плазмонной наночаструктурой, является источником

тепла в среде и определяется:

$$P = \int_{V} p(r)dV = \frac{1}{2} \operatorname{Re}\left[\int_{V} J^{*}(r)E(r)dV\right] = \sigma_{abs}I, \qquad (1)$$

где p(r) – плотность мощности, J – плотность тока, σ_{abs} – сечение поглощения, $I = c\varepsilon_0 n_s |E_0|^2 / 2$ (ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, c – скорость света, n_s – показатель преломления окружающей среды и E_0 – напряженность внутреннего электрического поля).

В стационарном режиме уравнение теплопроводности имеет вид:

$$\nabla [k(r)\nabla T(r)] = -p(r), \qquad (2)$$

где *k* – теплопроводность среды и предполагается, что она не зависит от температуры. Для наноструктуры, покрытой слоем полимера ПММА, приращение температуры имеет вид:

$$\Delta T = \frac{q}{4\pi k_{PMMA}\beta L} = \frac{\sigma_{abs}I}{4\pi k_{PMMA}\beta L},\tag{3}$$

где *β* – геометрический форм-фактор, *L* – поперечный размер наноструктуры.

3. Детектирование температуры стеклования

Температура стеклования полимерной пленки детектировалась с помощью термометрии комбинационного рассеяния света по отношению интенсивностей. Нагрев плазмонной наноструктуры регистрировался также с помощью термометрии комбинационного рассеяния света кремниевой подложки по отношению интенсивностей Стокса/Антистокса и сдвигу характерной линии кремния 520 см⁻¹:

$$\frac{I_s}{I_{as}} = \frac{\sigma_s}{\sigma_{as}} \frac{(\omega_0 - \Omega)^4}{(\omega_0 + \Omega)^4} \exp\left[\frac{\hbar\Omega}{k_B T}\right],\tag{4}$$

$$\Delta(T) = \Omega(T) - \Omega(T_0) = A \left(1 + \frac{2}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{2kT}} - 1} \right) + B \left(1 + \frac{3}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{3kT}} - 1} + \frac{3}{(e^{\frac{\hbar\omega_0}{3kT}} - 1)^2} \right),$$
(5)

где σ_s , σ_{as} – сечения Стоксова и Антистоксова рассеяния соответственно, ω_0 – частота падающего фотона, Ω – частота фонона, где $\Delta(T)$ – сдвиг пика комбинационного рассеяния света, *А* и *В* – константы, характерные определенному материалу, \hbar – постоянная Планка, k_B – постоянная Больцмана, *T* – абсолютная температура образца в единицах Кельвина, ω_0 – частота комбинационного рассеяния света при комнатной температуре.

Когда температура полимера приближается к температуре стеклования (T_g), некоторое количество тепла идет на размораживание колебательных и вращательных мод, и полимер начинает размягчаться. Это означает, что при прохождении T_g мы должны наблюдать замедление падения интенсивности пика комбинационного рассеяния света. В результате возникает характерный излом на температурной зависимости интенсивности пика комбинационного рассеяния пленки ПММА. На рис. 36 показаны спектры комбинационного рассеяния ПММА на подушке из TiN при различных

мощностях накачки. В линейном режиме интенсивность Стокса пропорциональна интенсивности накачки. Интенсивности Стоксовых линий соответствуют следующим модам колебаний: 601 см⁻¹ (C=O–C), 810 см⁻¹ (C–O–CH₃), 1460 см⁻¹ (O–CH₃). Стоксова интенсивность не меняется до тех пор, пока не произойдет стеклование.



Рис. 3. (а) Спектр комбинационного рассеяния света полимерной пленки ПММА; (б) Спектры комбинационного рассеяния света пленки ПММА, нагреваемой TiN; (в) График температурной зависимости интенсивности Стоксовой линии 810 см⁻¹ полимерной пленки ПММА

На рис. 3(в) изображены графики интенсивностей Стокса линии 810 см⁻¹ (С–О–СН₃) для ПММА на TiN наноструктуре (синие круги) и функция корреляции Пирсона в зависимости от мощности накачки. Локальная температура стеклования тонкой пленки ПММА была определена по изгибу в поведении кумулятивной корреляции Пирсона. Температура нагрева определялась с помощью термометрии комбинационного рассеяния света по отношению интенсивностей линий Анти-Стокса и Стокса. Используя плазмонную тугоплавкую метаповерхность, были найдены следующие значения локальной T_g для различных колебательных мод: 110 ± 6 °C (601 см^{-1}), 103 ± 5 °C (810 см^{-1}) и 120 ± 7 °C (1460 см^{-1}).

4. Выводы

Полученные значения температур стеклования для отдельных мод колебаний ПММА хорошо согласуются со значением температуры стеклования, полученной методом ДСК, а именно 109 °C. Диапазон локальной Т_g связан с разной динамикой размораживания колебательных мод. Таким образом, мы заключаем, что спектроскопия комбинационного рассеяния с использованием термоплазмонной метаповерхности представляет собой высокочувствительный инструмент для контроля температуры стеклования пространственно ограниченных полимеров. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №20-32-90090.

Литература

1. Gobin A. M. et al. Near-Infrared Resonant Nanoshells for Combined Optical Imaging and Photothermal Cancer Therapy // Nano Latters. 2007. V. 7. P. 1929–1934.
- 2. Jain P. K., El-Sayed I. H., El-Sayed M. A. Au nanoparticles target cancer // Nano Today. 2007. V. 2. P. 18–29.
- 3. Urban A. et al. Single-Step Injection of Gold Nanoparticles through Phospholipid Membranes// ACS Nano. 2011. V. 5. P. 3585–3590.
- 4. Carattino A., Caldarola M., Orrit M. Gold Nanoparticles as Absolute Nanothermometers // Nano Letters. 2018. V. 18. P. 874–880.
- 5. Li W. [et al.] Refractory plasmonics with titanium nitride: broadband metamaterial absorber// Advanced Materials. 2014. V. 26. P. 7959–7965.
- 6. Jin C. [et al.] Localized Temperature and Chemical Reaction Control in Nanoscale Space by Nanowire Array // Nano Letters. 2011. V. 11. P. 4818–4825.

Электронное научное издание сетевого распространения

КОГЕРЕНТНАЯ ОПТИКА И ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ

XXV Юбилейная международная молодежная научная школа

Казань, 27-29 октября 2021 г.

Сборник статей Вып. XXV

Подписано к использованию 03.02.2022. Формат 60×84 1/16. Гарнитура «Times New Roman». Усл. печ. л. 4,3 Заказ 3/2.

Издательство Казанского университета

420008, г. Казань, ул. Профессора Нужина, 1/37 тел. (843) 233-73-59, 233-73-28