

На правах рукописи



ГАРИФУЛЛИН Адель Ильдусович

**КВАНТОВО-ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В  
ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ И УПРАВЛЕНИЕ ЭНЕРГИЕЙ  
ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ И ЧАСТОТАМИ ФОТОНОВ,  
ИЗЛУЧАЕМЫХ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ**

Специальность 01.04.05 – Оптика

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Казань – 2021

Работа выполнена на кафедре оптики и нанопотоники ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (К(П)ФУ).

**Научный руководитель:** **Гайнутдинов Ренат Хамитович**,  
доктор физико-математических наук,  
профессор кафедры оптики и нанопотоники  
Института физики ФГАОУ ВО «Казанский  
(Приволжский) федеральный университет»

**Официальные оппоненты:** **Наумов Андрей Витальевич**,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий Отделом спектроскопии  
конденсированных сред Института  
спектроскопии РАН, г. Москва, г. Троицк

**Башаров Асхат Масхудович**,  
кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник НИЦ  
«Курчатовский институт» (Центр  
фундаментальных исследований), г. Москва

**Ведущая организация:** Казанский квантовый центр ФГБОУ ВО  
«Казанский национальный исследовательский  
технический университет имени  
А.Н. Туполева» (КНИТУ-КАИ), г. Казань

Защита состоится «16» сентября 2021 г. в 15 ч. 40 мин. на заседании диссертационного совета КФУ.01.02 при ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» по адресу: 420008 г. Казань, ул. Кремлевская, 16а, ауд. 110.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского Казанского (Приволжского) федерального университета (г. Казань, Кремлевская, д. 35). Электронная версия размещена на официальных сайтах ВАК при Министерстве науки и высшего образования РФ ([vak2.ed.gov.ru](http://vak2.ed.gov.ru)) и Казанского (Приволжского) федерального университета ([kpfu.ru](http://kpfu.ru)).

Автореферат разослан \_\_\_\_\_ 2021 года.

Ученый секретарь

диссертационного совета

доктор физ.-мат.наук, профессор



Камалова Д.И.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** Периодические изменения в физико-химических свойствах химических элементов определяются периодическим изменением их энергий ионизации. Данные величины являются постоянными для каждого элемента, что показано в периодической таблице химических элементов Д.И. Менделеева. Энергия ионизации является одной из главных характеристик атома, от которой в значительной степени зависит природа и прочность образуемых атомом химических связей. Важной физико-химической задачей в современной науке является ускорение химических и биохимических реакций в ограниченном пространстве, например, в микрополостях и в пористых материалах. Это, в свою очередь, важно для изучения химической кинетики реакций в ограниченном пространстве, а также для синтеза новых химических соединений, которые достаточно трудно создать в объемном растворе.

Вместе с этим, мы являемся свидетелями бурного развития оптических квантовых технологий, которое неразрывно связано с открытием, наблюдением и исследованием совершенно необычных квантовых эффектов. Будучи фундаментальными, квантовые эффекты начинают проявлять себя и активно использоваться в различных приложениях: при создании новых материалов с совершенно уникальными свойствами и возможностями, при разработке сверхбыстрых оптических – квантовых компьютеров, использующих законы квантовой теории для генерации, передачи, обработки и хранения информации и др. В последние несколько десятилетий существенный интерес исследователей привлекают новые структурированные среды как фотонные кристаллы (ФК). ФК имеют периодическую диэлектрическую структуру, и, как следствие, в их спектрах образуются фотонные запрещенные зоны (ФЗЗ) [1–3]. На основе свойств ФЗЗ ФК являются перспективным материалом для создания различных устройств фотоники: дифракционные решетки и фильтры, волноводы и оптические переключатели, сенсоры, низкопороговые лазеры и оптические запоминающие устройства, совместное применение которых является необходимым условием для создания квантовых компьютеров.

Начиная с пионерских работ В. Быкова, Э. Яблоновича и С. Джона [1–3], научные группы активно изучают различные квантово-электродинамические (КЭД) эффекты в среде ФК, такие как управление частотой спонтанного излучения и скоростью его испускания, фотон-атомное связанное состояние и локализация излучения вблизи краев ФЗЗ, спектральное расщепление линий, немарковский характер радиационного затухания, усиление эффекта квантовой интерференции, изменение массы покоя элек-

трона, вызванное модификацией взаимодействия электрона с собственным полем излучения [4] и др.

Для исследований КЭД эффектов в среде ФК необходимо развитие методов определения свойств электромагнитного поля в периодических структурах. Дисперсионные соотношения дают информацию о поведении фотона в периодической среде, что необходимо для теоретических исследований при создании устройств на основе ФК. Другой важной КЭД характеристикой является плотность фотонных состояний (ПС). Знание ПС в ФК является необходимым для описания различных КЭД явлений и процессов, описанных выше.

Особый интерес представляет исследование влияния среды ФК на процессы взаимодействия заряженных частиц с собственным полем излучения. Данное влияние выражается в изменении массы и энергии электрона, что находит свое отражение в дополнительных сдвигах и расщеплениях энергетических уровней атомов, помещенных в полости ФК [4]. Так как химические свойства электронной системы тесно связаны с энергетическими уровнями и волновыми функциями, то изменение массы и энергии электрона в ограниченной среде – полостях ФК приводит к изменению энергий ионизации атомов, следовательно, к изменению их физико-химических свойств. Это, как мы полагаем, позволит преодолеть ограничения, налагаемые периодическим законом таблицы химических элементов Менделеева на физико-химические процессы, и откроет новые горизонты в синтезе новых химических соединений, которые могут быть использованы в фармацевтике и в различных медицинских приложениях.

Вместе с этим, модифицированное электромагнитное поле ФК влияет на состояния, следовательно, на спектры излучения помещенных в них квантовых точек. Контроль состояний электрона или экситона (квазичастицы из электрона и дырки) искусственного атома, осуществляемый с помощью управления его собственнo-энергетической функцией, позволит сохранить когерентность света, что важно для создания однофотонных источников света с управляемой частотой генерируемых фотонов.

**Целью диссертационной работы** является развитие методов управления энергией ионизации, следовательно, управления физико-химическими свойствами атомов, помещенных в полости одномерных фотонных кристаллов на основе сред с высоким показателем преломления, а также управления частотами фотонов, излучаемых квантовыми точками. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие **задачи**:

1. Рассчитать дисперсионные соотношения, распределения компонент электромагнитного поля и плотности фотонных состояний для ТЕ- и ТМ-

поляризации в одномерном фотонном кристалле с помощью численного решения квантово-полевых уравнений Максвелла методом плоских волн и методом матриц распространения.

2. Вывести оператор поправки к электромагнитной массе электрона и рассчитать величину поправки к энергии  $S$ -состояния атома водорода и щелочных металлов, помещенных в полость одномерного фотонного кристалла.
3. Исследование влияния модификации взаимодействия электрона с собственным полем излучения в анизотропной среде одномерного фотонного кристалла на основе материалов с высоким показателем преломления на величину поправки к энергии ионизации атома водорода и щелочных металлов, а также на частоты фотонов, излучаемых квантовыми точками.
4. Рассчитать эффективный показатель преломления материалов, состоящих из ансамбля золотых наночастиц, покрытого пленкой из диоксида гафния, при различных периодах наноструктур с помощью модели эффективной среды с независимым контролем диэлектрической и магнитной проницаемости.

#### **Научные положения, выносимые на защиту:**

1. Эффект изменения массы электрона приводит к изменению энергии ионизации атомов, помещенных в полости фотонно-кристаллической структуры.
2. Этот эффект и возможность управления эффективным показателем преломления материалов, из которых сделан фотонный кристалл, позволяет управлять физико-химическими процессами, синтезом химических соединений в ограниченной среде фотонного кристалла.
3. Эффект изменения массы электрона позволяет управлять энергетическими уровнями квантовых точек, помещенных в фотонный кристалл. Изменение показателя преломления с помощью эффекта Керра позволяет управлять частотами фотонов, излучаемых квантовыми точками, что необходимо для создания однофотонных источников с управляемой частотой генерируемых фотонов.

#### **Научная новизна.**

1. Выведен оператор собственно-энергетической поправки к электромагнитной массе электрона, помещенного в полость одномерного фотонного кристалла.

2. Предложено при синтезе одномерного фотонного кристалла использовать материалы с высоким показателем преломления в качестве оптически плотных слоев фотонно-кристаллической структуры.
3. Выведена собственно-энергетическая поправка к энергии ионизации атома водорода и щелочных металлов, помещенных в полости одномерного фотонного кристалла.
4. Впервые установлено, что модификация взаимодействия электрона с собственным полем излучения в среде фотонных кристаллов значительно влияет на величину энергии ионизации помещенных в них атомов, а также на частоты фотонов, излучаемых квантовыми точками.
5. Показано, что поправка к энергии ионизации атомов является анизотропной величиной, которая зависит от направления импульса освобожденного электрона относительно оси периодичности одномерного фотонного кристалла. Установлено, что абсолютное значение поправки к энергии ионизации атомов растет квадратично с увеличением оптического контраста фотонно-кристаллической структуры. Таким образом, в качестве оптически плотных слоев одномерного фотонного кристалла использовались материалы с высоким показателем преломления. Изменяя параметры фотонного кристалла, такие как показатель преломления и толщина оптически плотных слоев, мы можем управлять энергией ионизацией атомов в достаточно широком диапазоне. Это, в свою очередь, позволяет преодолеть ограничения, налагаемые периодическим законом таблицы химических элементов Менделеева на физико-химические процессы, и открывает новые горизонты в синтезе новых химических соединений, которые могут быть использованы в фармацевтике и в различных медицинских приложениях.
6. Показано, что эффект изменения массы электрона позволяет управлять энергетическими уровнями квантовых точек, помещенных в периодическую среду фотонного кристалла. Изменяя показатель преломления с помощью эффекта Керра, можно управлять частотами фотонов, излучаемых квантовыми точками. Это может быть важно для создания однофотонных источников с управляемой частотой генерируемых фотонов.

**Научная значимость и практическая ценность работы.** Обнаружены закономерности влияния среды одномерного фотонного кристалла на процесс взаимодействия электрона с собственным полем излучения, выражающимся в изменении энергии ионизации атомов и частот фотонов, излучаемых квантовыми точками, помещенных в полости фотонно-кристаллической

структуры. Полученные и доказанные в настоящей работе анизотропность поправки к энергии ионизации атомов, а также ее квадратичный рост с увеличением показателя преломления оптически плотных слоев периодической структуры могут быть использованы для управления энергией ионизации атомов, помещенных в полости искусственной среды фотонных кристаллов. Как мы полагаем, данное исследование позволит преодолеть ограничения, налагаемые периодическим законом таблицы химических элементов Менделеева на физико-химические процессы, и открывает новые горизонты в синтезе новых химических соединений, которые могут быть использованы в фармацевтике и в различных медицинских приложениях. Показано, что эффект изменения массы электрона позволяет управлять энергетическими уровнями квантовых точек, помещенных в фотонный кристалл. Изменяя показатель преломления с помощью эффекта Керра, можно управлять частотами фотонов, излучаемых квантовыми точками. Это может быть важно для создания однофотонных источников с управляемой частотой генерируемых фотонов.

**Достоверность полученных результатов**, изложенных в настоящей работе, обеспечивается корректностью поставленной цели и задач, строгостью математических преобразований и корректностью физических допущений, использованием классических и современных квантово-электродинамических методов, которые являются наиболее точными в современной физике.

**Апробация работы**. Основные выводы и результаты работы докладывались на 2 всероссийских и 12 международных конференциях: VIII Международная конференция молодых ученых и специалистов «Оптика - 2013» (НИУ ИТМО, г. Санкт-Петербург, 2013); XVIII – XXIII Международная молодежная научная школа «Когерентная оптика и оптическая спектроскопия» (КФУ, г. Казань, 2014 – 2019); Всероссийская школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» (КФУ, г. Казань, 2014); Международный семинар «Нелинейная фотоника: теория, материалы, приложения» (СПбГУ, г. Санкт-Петербург, 2015); V Международная конференция по фотонике и информационной оптике (НИЯУ МИФИ, г. Москва, 2016); XI Международный симпозиум по фотонному эхо и когерентной спектроскопии (ФЭКС – 2017) (Российская академия наук, г. Светлогорск, 2017); XVI Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике (Самара – 2018) (СФ ФИАН, г. Самара, 2018); XIII Международные чтения по квантовой оптике (IWQO–2019) (ВлГУ, г. Владимир, 2019); XXIV Объединенная международная молодежная научная школа «Когерентная оптика и оптическая

спектроскопия» и «Квантовая информатика и квантовые сенсоры на основе алмазов» (КФУ, г. Казань, 2020).

**Личный вклад автора** состоит в участии в постановке задач по теме диссертации и определении подходов их решения; в анализе литературных данных; в выводе оператора собственно-энергетической поправки к электромагнитной массе электрона, поправки к энергии ионизации атомов и собственно-энергетической функции экситона квантовой точки, помещенных в полости одномерного фотонного кристалла. Численные расчеты функции дисперсии метаматериалов с высоким показателем преломления, расчет величины поправки к энергии ионизации атомов, собственно-энергетической функции экситона и спектров излучения квантовой точки проводились лично автором. Автор участвовал в обсуждении результатов научной работы, а также в формулировке выводов. Подготовка к публикации результатов исследований велась при непосредственном участии автора настоящей диссертационной работы.

**Публикации по теме диссертационной работы.** Основные результаты диссертации опубликованы в 18 работах, 8 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК [A1 – A8], 10 в сборниках тезисов и трудов международных и всероссийских конференций [A9 – A18].

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка авторских публикаций по теме диссертации и списка литературы, включающего 210 наименований. Объем диссертационной работы составляет 153 страницы, включая 37 иллюстраций.



## Основное содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках настоящей диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи, сформулирована научная новизна, практическая значимость представляемой работы и основные положения, выносимые на защиту.

В §1.1 и 1.2 первой главы рассматриваются основные физические свойства ФК и методы их синтеза. В §1.3 приводится описание и условия наблюдения различных квантово-электродинамических эффектов, исследуемых в среде ФК, таких как усиление и подавление спонтанного излучения [1–3], возникновение фотон-атомных связанных состояний и локализация излучения вблизи краев ФЗЗ, изменение массы покоя электрона, вызванное модификацией взаимодействия электрона с собственным полем излучения [4] и пр. Показано, что при условии большого оптического контраста фотонно-кристаллической структуры, сдвиг уровней энергии атомов, помещенных в полости периодической диэлектрической структуры, составляет единицы электровольта, что превышает как минимум на 4 порядка лэмбовский сдвиг атомарного водорода в данной среде.

Вторая глава посвящена исследованию дисперсионных соотношений и плотности фотонных состояний в среде ФК. В §2.1 описан метод плоских волн и в §2.2 метод матриц распространения, с помощью которых производится численное решение квантово-полевых уравнений Максвелла с нахождением собственных функций и собственных значений: дисперсионных соотношений и распределения компонент электромагнитного поля для ТЕ- и ТМ-поляризации в одномерном ФК. В §2.3 особое внимание уделено точному расчету плотности фотонных состояний для двух типов поляризации в искусственной среде ФК, показано (рис. 1), что величина ПС значительно модифицируется в периодической структуре, принимая форму пилообразной возрастающей кривой с пиками, возникающими на краях зон Бриллюэна. Данные пики (сингулярности Ван-Хова) соответствуют ФЗЗ в дисперсионных соотношениях, следовательно, некоторые компоненты групповой скорости фотонов стремятся к нулю при данных частотах. Таким образом, значительная модификация ПС ведет к усилению взаимодействия света и вещества, которое выражается в возникновении фотон-атомных связанных состояний, локализации фотонов в ФЗЗ, возникновению одетых состояний – расщеплению энергетических уровней атомов, находящихся в ФК. В связи с наблюдаемым в последние несколько лет прогрессом в проектировании метаматериалов с высоким показателем преломления для оценки ПС в одномерном ФК в качестве оптически плотного слоя мы использовали арсенид галлия ( $n_{eff} = 3,5$ )

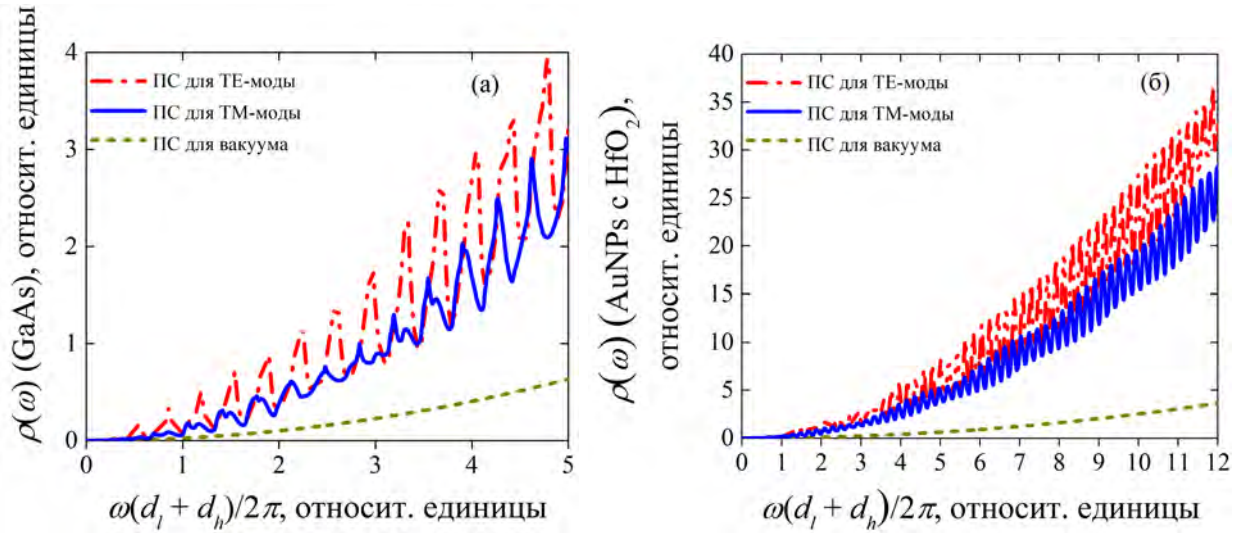


Рис. 1: Плотность состояний (ПС) для одномерного ФК с оптически плотным слоем из (а) арсенида галлия с  $n_h = 3,5$  и (б) метаматериала на основе золотых наночастиц, покрытых пленкой из HfO<sub>2</sub>, с  $n_h = 6$  и с относительной толщиной слоев  $d_h/T = 2/3$  в обоих случаях. В качестве другой среды был выбран слой с показателем преломления  $n_l = 1$  и с относительной толщиной  $d_l/T = 1/3$ . Прерывистая линия соответствует плотности мод неполяризованного света в вакууме [5].

и метаматериал с высоким показателем преломления ( $n_{eff} = 6$ ), состоящий из золотых наночастиц (от англ. *Au nanoparticles*, AuNPs) с диэлектрической матрицей на основе HfO<sub>2</sub> [5].

Также в данной главе в §2.4 приводится вывод и расчет собственно-энергетической функции квантовой точки, помещенной в анизотропную среду одномерного фотонного кристалла.

**Третья глава** посвящена описанию и исследованию собственно-энергетической поправки, возникающей при перемещении заряженной частицы из вакуума в среду ФК, к массе электрона, а также к его кинетической энергии. В §3.1 приведен вывод и расчет поправки к массе электрона, показано, что в периодической среде ФК масса электрона является анизотропной величиной, зависящей от направления импульса электрона. В §3.2 проведен расчет матричных элементов собственно-энергетической поправки электрона. В §3.3 на примере  $S$ -состояния атома водорода проведен расчет энергетического сдвига, обусловленного модификацией взаимодействия атомарного электрона с собственным полем излучения в полости ФК (рис. 2), при этом использовались рассчитанные ранее функции ПС (рис. 1). Показано, что при определенных условиях поправка к кинетической энергии электрона атома водорода, находящегося в  $S$ -состоянии, вызванная модификацией электромагнитного вакуума средой ФК, может быть сопоставимой со стандартным

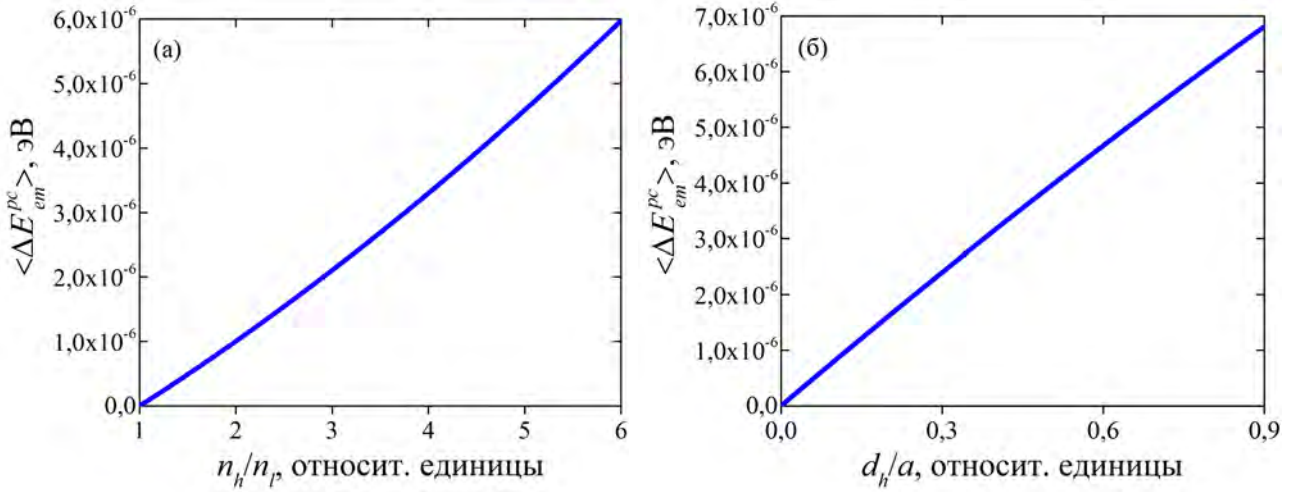


Рис. 2: Зависимость поправки к кинетической энергии состояния  $1s$  атома водорода (а) от оптического контраста  $n_h/n_l$ , (б) от относительной толщины  $d_h/a$  слоя с высоким показателем преломления. Параметры ФК: (а)  $n_l = 1$  и  $d_l/a = 1/3$ ,  $\max(n_h) = 6$  и  $d_h/a = 2/3$ ; (б)  $n_l = 1$  и  $\max(d_l/a) = 1$ ,  $n_h = 6$  и  $\max(d_h/a) = 9/10$ . Период структуры ФК  $a = 750$  нм. Естественный параметр обрезания  $\Lambda = 12$  эВ [5].

лэмбовским сдвигом (при этом, как было сказано ранее, поправка к массе электрона в ФК превышает лэмбовский сдвиг как минимум на 4 порядка). Возможным применением изучаемого эффекта может быть, например, прецизионное управление уровнями энергии атомов [5].

В разделе §3.4 проведен точный вывод оператора наблюдаемой  $\delta m_{pc}$  к электромагнитной массе электрона в среде ФК с использованием поперечных компонент электромагнитного поля ТЕ- и ТМ-поляризации:

$$\delta m_{pc}(\hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}}) = A + (\hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{I}}_{pc})^2 B, \quad (1)$$

где  $\hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}$  является единичным вектором, направленным вдоль импульса электрона, а  $\hat{\mathbf{I}}_{pc}$  является единичным вектором оси одномерного ФК, который совпадает с вектором  $\mathbf{e}_z$ ,  $(\hat{\mathbf{I}}_{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{I}}_{pc}) = \cos \Theta$  и

$$A = \frac{\alpha}{\pi} \sum_{n, G} \int k_{\rho} dk_{\rho} \int_{FBZ} dk_z \left( \frac{|E_{\mathbf{kn}1}(G)|^2}{\omega_{\mathbf{kn}1}^2} \frac{(k_z + G)^2}{k_{\rho}^2 + (k_z + G)^2} + \frac{|E_{\mathbf{kn}2}(G)|^2}{\omega_{\mathbf{kn}2}^2} \right) - \frac{4\alpha}{3\pi} \int dk, \quad (2)$$

$$B = \frac{\alpha}{\pi} \sum_{n, G} \int k_{\rho} dk_{\rho} \int_{FBZ} dk_z \left( \frac{|E_{\mathbf{kn}1}(G)|^2}{\omega_{\mathbf{kn}1}^2} \frac{2k_{\rho}^2 - (k_z + G)^2}{k_{\rho}^2 + (k_z + G)^2} - \frac{|E_{\mathbf{kn}2}(G)|^2}{\omega_{\mathbf{kn}2}^2} \right). \quad (3)$$

Коэффициенты  $A$  и  $B$  выведены аналитически строго, без каких-либо приближений, что важно для точной оценки величины  $\delta m_{pc}$  в одномерном ФК. Оператор поправки к массе в виде (1) может быть использован при расчете диагональных и недиагональных матричных элементов данного оператора, для оценки величины поправки к массе свободного или атомарного электрона, поправки к энергии ионизации атомов и вероятностей безызлучательных переходов между энергетическими уровнями. В работах было показано, что поправка к электромагнитной массе электрона атома водорода и щелочных металлов, находящихся в  $S$ -состоянии и помещенных в одномерный ФК на основе чередующихся слоев GaAs и вакуума в первом случае, слоев аморфного  $a\text{-SiN}_x\text{:H}$  и вакуума во втором случае и слоев метаматериала и вакуума в третьем случае, составила 0,146 эВ, 0,159 эВ и 7,112 эВ, соответственно.

В разделе §3.5 приведены расчеты спектров излучения одиночной квантовой точки, помещенной в среду одномерного ФК на основе вакуумных полостей и слоев GaAs. Рассматривается энергия электронного перехода  $P - S$  состояний одноэлектронной квантовой точки InAs/GaAs. Показано, что при перемещении искусственного атома из свободного пространства в периодическую среду энергия данного перехода приобретает поправку, равную  $\Delta z_1 = 1,537$  мэВ. Используя электрооптический эффект Керра в ФК, мы можем управлять показателем преломления слоев GaAs, таким образом, можем управлять собственно-энергетической поправкой, соответственно, спектрами излучения квантовой точки. Соответствующий сдвиг спектральной линии составил  $\Delta z_2 = 0,180$  мэВ (рис. 3).

В §3.6 приводится доказательство конечности-нерасходимости поправки к электромагнитной массе электрона при больших энергиях виртуальных фотонов. Таким образом, поправка к электромагнитной массе электрона в ФК не имеет ультрафиолетовой расходимости, это означает, что она является наблюдаемой величиной.

**Четвертая глава** посвящена развитию методов управления энергией ионизации атомов в периодической среде ФК. В данной главе впервые приведен расчет поправки к энергии ионизации атомов водорода и щелочных металлов, находящихся в полостях одномерного ФК. Вывод формулы поправки к энергии ионизации проводился строго, без каких-либо приближений, учитывая поляризационную структуру электромагнитного поля [6].

В §4.1 описывается гамильтониан атома в ФК. В §4.2 показана возможность использования метаматериалов с высоким показателем преломления в качестве оптически плотных слоев фотонных кристаллов. Описываются различные модели эффективной среды, обсуждаются их преимущества и недостатки. В §4.3 проведен расчеты функции дисперсии для метаматериала-

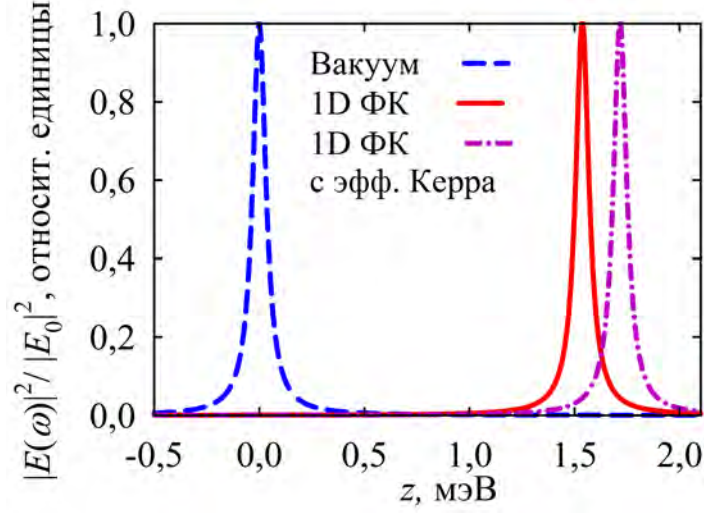


Рис. 3: Спектр излучения (лоренцевский контур) квантовой точки InAs/GaAs, помещенной в среду одномерного ФК на основе оптически плотных слоев из GaAs. Синяя штриховая линия соответствует излучению квантовой точки в вакууме, красная сплошная линия сдвинута относительно синей на  $\Delta z_1 = 1,537$  мэВ – излучение квантовой точки 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  $\sim 800$  мкДж/см<sup>2</sup>). 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 квантовой точки InAs/GaAs:  $\Gamma$  (скорость затухания) = 77 мкэВ,  $T = 4$  К, энергия перехода экситона квантовой точки  $\omega_x = 830$  мэВ. В задаче мы рассматриваем одноэлектронный искусственный атом.

лов с высоким показателем преломления (рис. 4). Продемонстрирован вывод, расчет и возможность управления величиной поправки к энергии ионизации атома водорода и щелочных металлов (рис. 5 и 6) [6]:

$$\delta E_{ion}^{pc} = -\frac{2\alpha}{3\pi} \sum_{n, G} \left[ \int k_\rho dk_\rho \int_{FBZ} dk_z \left( \frac{|E_{\mathbf{k}n1}(G)|^2}{\omega_{\mathbf{k}n1}^2} \cdot \frac{k_{Gz}^2 - 2k_\rho^2}{k_\rho^2 + k_{Gz}^2} + \frac{|E_{\mathbf{k}n2}(G)|^2}{\omega_{\mathbf{k}n2}^2} \right) \right], \quad (4)$$

где амплитуды электрического поля  $E_{\mathbf{k}n1}(G)$  и  $E_{\mathbf{k}n2}(G)$ , соответствующие амплитудам поля для ТЕ- и ТМ-поляризации, рассчитываются точно с помощью квантово-полевых уравнений Максвелла и метода плоских волн.

Далее была доказана квадратичная зависимость данной поправки от оптического контраста среды одномерного ФК. Таким образом, для исследования и наблюдения эффекта изменения энергии ионизации атомов в среде ФК необходимы материалы с настраиваемым высоким показателем прелом-

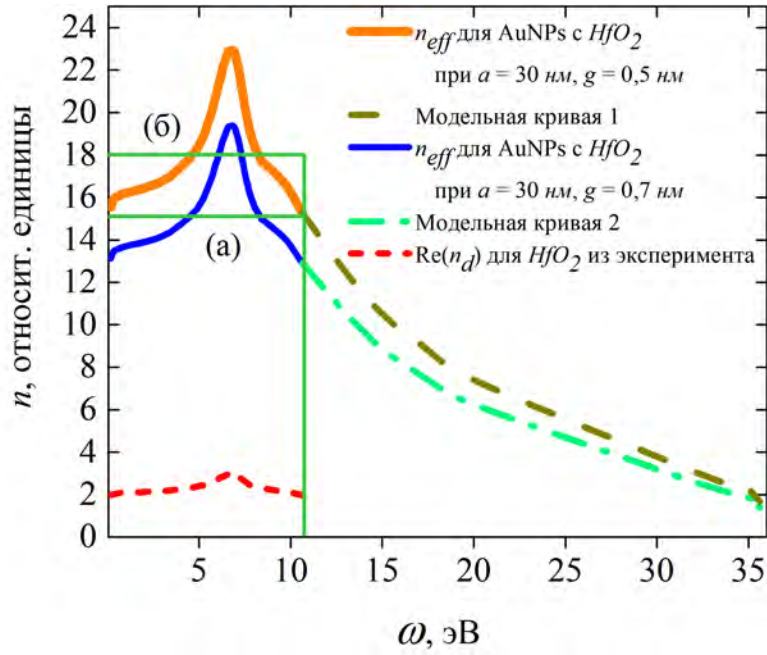


Рис. 4: Спектральные зависимости  $n_{eff}(\omega)$  для метаматериала, состоящего из ансамбля наночастиц золота (AuNPs), покрытого  $\text{HfO}_2$  (толстая сплошная оранжевая и голубая линии). Зависимости получены из экспериментальной кривой ( $n_d(\omega) \approx \sqrt{\varepsilon_d(\omega)}$  для  $\text{HfO}_2$ ) (красная штриховая кривая) с использованием модели эффективной среды, при которой  $n_{eff}(\omega) = [(a/g)\varepsilon_d(\omega)]^{1/2}$ ,  $a = 30$  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 (а)  $n_{eff} = 15$  and (б)  $n_{eff} = 18$  даны для первой и второй спектральных линий при максимальной частоте фотонов  $\omega_{kn2}^{\max} = 10,65$  эВ.

ления в достаточно широком спектральном диапазоне. Для демонстрации возможности управления энергиями ионизации атома водорода и щелочных металлов была оценена поправка к энергии ионизации  $\delta E_{ion}^{pc}$  атомов, помещенных в полости ФК с оптически плотными слоями на основе метаматериала с высоким показателем преломления и параметрами  $a = 30$  нм,  $g = 0,7$  нм и  $a = 30$  нм,  $g = 0,5$  нм, при которых возможно достижение больших значений эффективного показателя преломления оптически плотного слоя (рис. 4). При этом величина поправки составила  $-1,82$  эВ и  $-2,64$  эВ для первой и второй пары параметров, соответственно. Сравнение величин энергий ионизации для случая вакуума и среды ФК приведено на рис. 5 и рис. 6 [6].

В §4.4 приводится схема экспериментальной проверки изменения энергии ионизации атомов в одномерном фотонном кристалле на основе метаматериала с высоким показателем преломления. В качестве одной из возможных схем эксперимента, по нашему мнению, может быть помещение фотонно-

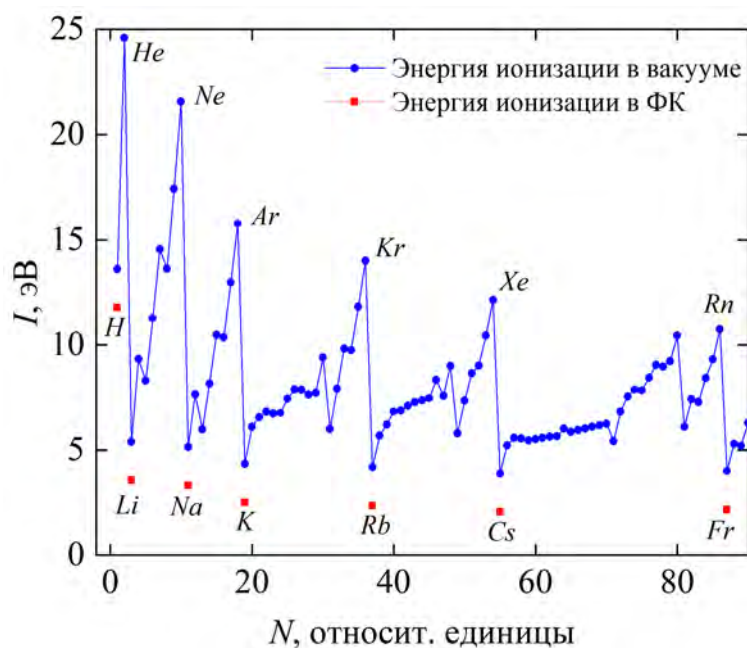


Рис. 5: Сравнение энергии ионизации атома водорода и щелочных металлов для случая вакуума (синие точки) и среды ФК (красные квадраты) на основе метаматериала с  $a = 30$  нм,  $g = 0,7$  нм. Поправка к энергии ионизации равна  $\delta E_{ion}^{pc} = -1,82$  эВ.

кристаллической структуры в герметичную колбу и измерение скорости реакции реагирующих веществ, находящихся в газовой фазе и закачанных в полости достаточно большого высококачественного ФК.

Важно подчеркнуть, что периодические изменения в физических и химических свойствах химических элементов обусловлены периодическим изменением их энергий ионизации. Энергия ионизации каждого элемента является постоянной величиной, что прописано таблицей Менделеева. Было продемонстрировано, что энергии ионизации атомов могут значительно меняться, когда атомы помещены в ФК, состоящий из полостей и метаматериалов с высоким показателем преломления. Настройка показателя преломления в данных материалах приводит к возможности управления величиной энергии ионизации в широком диапазоне. Это, в свою очередь, позволяет преодолеть ограничения на физические и химические процессы, налагаемые периодической таблицей, а также может открыть новые горизонты в синтезе необычных химических соединений, что может быть использовано в фармацевтике и медицине.

В **заключении** приведены основные результаты и выводы работы:

1. Рассчитаны дисперсионные соотношения, распределения компонент электромагнитного поля и плотности фотонных состояний для ТЕ- и ТМ-поляризации в одномерном фотонном кристалле с помощью числен-

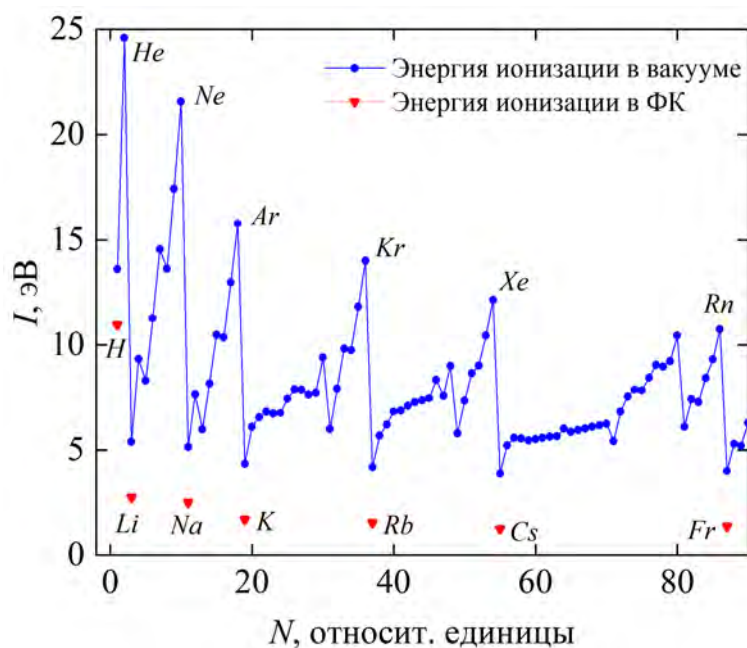


Рис. 6: Сравнение энергии ионизации атома водорода и щелочных металлов для случая вакуума (синие точки) и среды ФК (красные треугольники) на основе метаматериала с  $a = 30$  нм,  $g = 0,5$  нм. Поправка к энергии ионизации равна  $\delta E_{ion}^{pc} = -2,64$  эВ.

ного решения квантово-полевых уравнений Максвелла методом плоских волн и методом матриц распространения.

2. Впервые исследовано влияние модификации взаимодействия электрона с собственным полем излучения в анизотропной среде одномерного фотонного кристалла на основе материалов с высоким показателем преломления на величину поправки к энергии ионизации атома водорода и щелочных металлов, а также на частоты фотонов, излучаемых квантовыми точками.
3. Рассчитан эффективный показатель преломления материалов, состоящих из ансамбля золотых наночастиц, покрытого пленкой из диоксида гафния, при различных периодах наноструктур с помощью модели эффективной среды с независимым контролем диэлектрической и магнитной проницаемости.
4. Использование материалов с высоким показателем преломления в фотонных кристаллах позволяет выходить за рамки, налагаемые периодическим законом таблицы химических элементов Менделеева на физико-химические процессы, и открывает новые горизонты в синтезе новых химических соединений, которые могут быть использованы в фармацевтике и в различных медицинских приложениях.



5. Эффект изменения массы электрона позволяет управлять энергетическими уровнями квантовых точек, помещенных в фотонный кристалл. Изменяя показатель преломления с помощью эффекта Керра, можно управлять частотами фотонов, излучаемых квантовыми точками. Это может быть важно для создания однофотонных источников с управляемой частотой генерируемых фотонов.

## Список работ, опубликованных по теме диссертации

Статьи в рецензируемых журналах:

- A1. Quantum electrodynamics in photonic crystals and controllability of ionization energy of atoms / R.Kh. Gainutdinov, **A.I. Garifullin**, M.A. Khamadeev, M.Kh. Salakhov // Phys. Lett. A. – 2021. – V. 404. – P. 127407(1-7).
- A2. Modification of the interaction of an electron with its own radiation field in photonic crystals with high-refractive layers / **A.I. Garifullin**, M.A. Khamadeev, A.V. Sarafannikova, M.Kh. Salakhov // J. Phys. Conf. Ser. – 2021. – V. 1890. – № 1. – P. 012003(1-7).
- A3. Strong interaction of a quantum dot with the photon reservoir in one-dimensional photonic crystals / R.Kh. Gainutdinov, L.J. Nabieva, **A.I. Garifullin**, A.A. Mutygullina // J. Phys. Conf. Ser. – 2021. – V. 1890. – № 1. – P. 012002(1-5).
- A4. Quantum interference via nonradiative transitions between energy levels of atoms in one-dimensional photonic crystals / R.Kh. Gainutdinov, **A.I. Garifullin**, M.A. Khamadeev, M.Kh. Salakhov // J. Phys. Conf. Ser. – 2020. – V. 1628. – № 1. – P. 012006(1-6).
- A5. Nonperturbative renormalization of the interaction of quantum dots with the phonon reservoir / R.Kh. Gainutdinov, L.J. Nabieva, **A.I. Garifullin**, A.A. Mutygullina // J. Phys. Conf. Ser. – 2020. – V. 1628. – № 1. – P. 012005(1-8).
- A6. Gainutdinov, R.Kh. Effect of Changing the Electron Mass and Physicochemical Processes in One-Dimensional Photonic Crystals / R.Kh. Gainutdinov, **A.I. Garifullin**, M.A. Khamadeev // Bull. Lebedev Phys. Inst. – 2019. – V. 46. – № 4. – P. 115-117.
- A7. Dressing of superconducting qubits by their interaction with a low frequency photon reservoir / R.Kh. Gainutdinov, L.J. Nabieva, **A.I. Garifullin**, A.A. Mutygullina // J. Phys. Conf. Ser. – 2019. – V. 1283. – № 1. – P. 012004(1-6).

- A8. Electromagnetic mass of an electron in one-dimensional photonic crystal / R. Kh. Gainutdinov, **A.I. Garifullin**, K.A. Ziyatdinova, M.A. Khamadeev, M.Kh. Salakhov // J. Phys. Conf. Ser. – 2018. – V. 1068. – № 1. – P. 012005(1-4).

Тезисы и материалы конференций:

- A9. Модификация взаимодействия электрона с собственным полем излучения в фотонных кристаллах с большим оптическим контрастом / Р.Х. Гайнутдинов, **A.I. Гарифуллин**, М.А. Хамадеев, М.Х. Салахов // Сборник трудов XXIV Объединенной международной молодежной научной школы «Когерентная оптика и оптическая спектроскопия» и «Квантовая информатика и квантовые сенсоры на основе алмазов». – Казань: Изд-во Казанского университета. – 2020. – С. 44-47, ISBN 978-5-00130-448-7.
- A10. Метаматериалы с высоким показателем преломления и управление физико-химическими процессами в среде фотонных кристаллов / Р.Х. Гайнутдинов, **A.I. Гарифуллин**, М.А. Хамадеев, М.Х. Салахов // Сборник трудов XXIII Международной молодежной научной школы «Когерентная оптика и оптическая спектроскопия». – Казань: Изд-во «ФЭН» АН РТ. – 2019. – С. 60-64, ISBN 978-5-9690-0655-3.
- A11. Взаимодействие атома с собственным полем излучения и физико-химические процессы в фотонном кристалле / Р.Х. Гайнутдинов, **A.I. Гарифуллин**, М.А. Хамадеев, М.Х. Салахов // XIII Международные чтения по квантовой оптике (IWQO-2019): Сборник тезисов. г. Владимир, 9 - 14 сентября 2019 г. [Электронное издание]. – Москва: Тривант. – 2019. – 429 с.: ил. – С. 288-289, ISBN 978-5-89513-451-1.
- A12. Гайнутдинов, Р.Х. Эффект изменения массы электрона и физико-химические процессы в одномерных фотонных кристаллах / Р.Х. Гайнутдинов, **A.I. Гарифуллин**, М.А. Хамадеев // XVI Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике (Самара - 2018): Сборник трудов конференции. - Москва: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН. – 2018. – С. 71-77, ISBN 978-5-902622-39-0.
- A13. Влияние изменения массы электрона на физико-химические процессы в среде фотонных кристаллов / Р.Х. Гайнутдинов, **A.I. Гарифуллин**, М.А. Хамадеев, М.Х. Салахов // Сборник трудов XXII Международной

молодежной научной школы «Когерентная оптика и оптическая спектроскопия». – Казань: Изд-во «ФЭН» АН РТ. – 2018. – С. 58-62, ISBN 978-5-9690-0471-9.

- A14. Электромагнитная масса электрона в одномерном фотонном кристалле / Р.Х. Гайнутдинов, **А.И. Гарифуллин**, М.А. Хамадеев, М.Х. Салахов // XI международный симпозиум по фотонному эхо и когерентной спектроскопии (ФЭКС - 2017): Сборник тезисов. г. Светлогорск, Калининградской обл. 16 - 21 сентября 2017 г. [Электронное издание]. – Москва: Тривант. – 2017. – С. 86-87, ISBN 978-5-89513-421-4.
- A15. **Гарифуллин, А.И.** Вычисление дисперсионных соотношений в фотонных кристаллах методом плоских волн и методом матриц распространения / А.И. Гарифуллин, М.А. Хамадеев, Р.Х. Гайнутдинов // Сборник научных трудов V Международной конференции по фотонике и информационной оптике. – Москва: Сборник научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ. – 2016. – С. 386. – УДК 535(06) +004(06), ISBN 978-5-7262-2215-8.
- A16. **Garifullin, A.I.** Defining the Properties of the Electromagnetic Field in Photonic Crystals by Method of Plane Waves Expansion / A.I. Garifullin, M.A. Khamadeev, R.Kh. Gainutdinov // Book of abstracts. International Workshop «Nonlinear Photonics: Theory, Materials, Applications». – St. Petersburg: Saint-Petersburg State University. – 2015. – P. 79.
- A17. **Гарифуллин, А.И.** Моделирование свойств электромагнитного поля в фотонных кристаллах с помощью метода плоских волн / А.И. Гарифуллин, Р.Х. Гайнутдинов // Сборник тезисов докладов Всероссийской школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века». – Казань: Изд-во Казанского университета. – 2014. – С. 207.
- A18. **Гарифуллин, А. И.** Синтез фотонных кристаллов на основе диоксида кремния и методы их исследования / А.И. Гарифуллин, А.А. Ахмадеев, М.А. Хамадеев // Сборник трудов VIII Международной конференции молодых ученых и специалистов «Оптика - 2013». – Санкт-Петербург: Изд-во НИУИТМО. – 2013. – Т. 1. – С. 353.

## Список цитируемой литературы

- [1] Bykov V.P. Spontaneous Emission in a Periodic Structure / V.P. Bykov // Sov. J. Exp. Theor. Phys. – 1972. – V. 35. – № 2. – 269-273.

- [2] Yablonovitch, E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics / E. Yablonovitch // Phys. Rev. Lett. – 1987. – V. 58. – № 20. – P. 2059-2062.
- [3] John, S. Strong Localization of Photons in Certain Disordered Dielectric Superlattices / S. John // Phys. Rev. Lett. – 1987. – V. 58. – № 23. – P. 2486-2489.
- [4] Gainutdinov, R.Kh. Electron rest mass and energy levels of atoms in the photonic crystal medium / R.Kh. Gainutdinov, M. A. Khamadeev, M. Kh. Salakhov // Phys. Rev. A. – 2012. – V. 85. – № 5. – P. 053836(1-7).
- [5] Gainutdinov, R.Kh. Effect of Changing the Electron Mass and Physicochemical Processes in One-Dimensional Photonic Crystals / R.Kh. Gainutdinov, A.I. Garifullin, M.A. Khamadeev // Bull. Lebedev Phys. Inst. – 2019. – V. 46. – № 4. – P. 115-117.
- [6] Quantum electrodynamics in photonic crystals and controllability of ionization energy of atoms / R.Kh. Gainutdinov [et al.] // Phys. Lett. A. – 2021. – V. 404. – P. 127407(1-7).