

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЛАБОРАТОРИЯ

Научный отчет за 1999 г.

1. Наиболее значимые результаты за 1999 г.

Предложен метод создания оптически индуцированного хирального состояния в молекуле перекиси водорода и развита соответствующая теория процессов возбуждения и экспериментальной регистрации индуцированной оптической активности в смеси хиральных молекул, содержащих первоначально одинаковое количество лево- и право-ориентированных молекул.

Исследованы возможности создания перепутанных состояний в системе двух двух- и трехуровневых атомов с использованием методов импульсной и стационарной оптической накачки и стимулированного рамановского адиабатического переноса. Показано, что с использованием Λ -систем экспериментально возможно достижение критического значения качества созданных состояний, необходимого для экспериментального доказательства существенно квантового характера двухатомных корреляций по критерию неравенств Белла.

Исследованы процессы обмена квантовой информацией в важнейших физических квантовых каналах в ряде простых квантовых систем: состояния двухуровневого атома в два различных момента времени; две подсистемы уровней в одном атоме; двухуровневый атом и электромагнитное поле; два двухуровневых атома, взаимодействующих через поле вакуума либо управляемых внешним полем; произвольная квантовая система до преобразования и после процедуры квантового измерения или дублирования. Показано, что когерентная информация является эффективно вычисляемой и наиболее адекватной мерой для описания потенциальной информативности различных схем экспериментальных измерений с квантовыми системами.

2. Наиболее значимые результаты за последние 5 лет

Выполнен цикл исследований по молекулярно-динамическому моделированию динамики фотоизомеризации изолированных и адсорбированных на поверхность многоатомных молекул на примере молекулы стильбена. Показано, что динамика фотоизомеризации формируется с участием многих (до 20) активных нормальных мод молекулы и, таким образом, определяет развитие реакции фотоизомеризации на многомерной потенциальной поверхности.

В теории резонанса когерентного пленения излучения выявлена фундаментальная роль четырехфотонных взаимодействий и показано существование обусловленного ими принципиального предела ширины резонанса Λ -систем.

Предложен метод создания оптически индуцированного хирального состояния в молекуле перекиси водорода и развита соответствующая теория процессов возбуждения и экспериментальной регистрации индуцированной оптической активности.

3. Список статей и препринтов за 1999 год

- 3.1. Б.А. Гришанин, В.Н. Задков, *Фотоиндуцированная хиральность молекул перекиси водорода*, ЖЭТФ, т. 116 вып. 4, №10, с. 1250–1263 (1999)
- 3.2. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, *Photoinduced chirality of hydrogen peroxide molecules*; LANL e-print physics/9906034 (1999).
- 3.3. Б. А. Гришанин, *Нелинейная столкновительная релаксация двухуровневых атомов в лазерном поле*, Вестн. МГУ, сер. 3, Физ. и Астрон., № 2, с. 30–33 (1999).
- 3.4. I.V. Bargatin***, B.A. Grishanin, V.N. Zadkov, *Generation of entanglement in a system of two dipole-interacting atoms by means of laser pulses*, Fortschritte der physik (in press) (1999).
- 3.5. I.V. Bargatin***, B.A. Grishanin, V.N. Zadkov, *Generation of entanglement in a system of two dipole-interacting atoms by means of laser pulses*, LANL e-print quant-ph/9903056 (1999).
- 3.6. И. В. Баргагин***, Б. А. Гришанин, *Спектры флуоресценции и поглощения лямбда-системы в условиях рамановского резонанса*, Оптика и спектроскопия, т. 87, №. 3, стр. 400-408 (1999).

- 3.7. I.V. Bargatin***, B.A. Grishanin, V.N. Zadkov, *Creation of radiatively stable entanglement in a system of two dipole-interacting three-level atoms*, submitted to Phys. Rev. A
- 3.8. I.V. Bargatin***, B.A. Grishanin, V.N. Zadkov, *Creation of radiatively stable entanglement in a system of two dipole-interacting three-level atoms*, LANL e-print quant-ph/9911112 (1999).
- 3.9. I.V. Bargatin***, B.A. Grishanin, V.N. Zadkov, *Fluorescence and absorption properties of a driven Lambda-system*, Proceedings of SPIE, A. V. Andreev, S. N. Bagayev, A. S. Chirkin and V. I. Denisov, eds. v. 3736, pp. 246–254 (1999).
- 3.10. R. Wynands, A. Nagel, D. Meschede, B. A. Grishanin and V. N. Zadkov, *Light shift of coherent population trapping resonances*, Proceedings of SPIE, A. V. Andreev, S. N. Bagayev, A. S. Chirkin and V. I. Denisov, eds. v. 3736, pp. 187–192 (1999).

4. Список докладов и публикаций в трудах конференций за 1999 г.

- 4.1. **II Съезд Биофизиков России, Москва, август, 1999**
Гришанин Б. А., Кубасов А. А., Романовский Ю. М., Чикишев А. Ю., Шувалова Е. В., *Динамика переноса протона в активном центре сериновых протеиназ*, II Съезд Биофизиков России, Москва, август, 1999, т. I, стр. 27.
- 4.2. **First Russian-French Workshop Lasers, Mesures de Précision et Optique Quantique, Les Houches, France, September 26 – October 1, 1999**
B. A. Grishanin, V. N. Zadkov, I. V. Bargatin, R. Wynands, and D. Meschede, *Spectroscopic Properties of a Driven Lambda-system*, France, September 26 – October 1, 1999.
- 4.3. **Quantum Optics Summer School, Bonn, Germany, August 12-16, 1999**
V.N.Zadkov, "Introduction to Laser-Matter Interaction", 8 hrs course of lectures, Bonn, Germany, August 12-16, 1999.
- 4.4. **International Conference for Students, Young Scientists and Engineers Optics'99, St. Petersburg, Russia, October 19-21, 1999**
I. V. Bargatin, *Creation of entangled states of two dipole-interaction atoms*, St. Petersburg, Russia, October 19-21, 1999.
- 4.5. **III Adriatic research conference on Quantum Interferometry, Trieste, Italy, March 1-5, 1999**
I. V. Bargatin, *Entanglement in a system of two dipole-interacting atoms*, poster presentation, Trieste, Italy, March 1-5, 1999.
- 4.6. **Int. Conf. on Laser Technologies, Shatura, Moscow Region, June 24, 1999**
B. A. Grishanin, V. I. Panov, and V. N. Zadkov, *Leading embodies of experimental realization of quantum computers*, Shatura, Moscow Region, June 24, 1999.
- 4.7. **Seminar, Department of Physics, Columbia University, New York, N.Y., USA, June 1, 1999**
B. A. Grishanin, S. Yu. Kotkov, and V. N. Zadkov, *Comparative Study of Photoinduced Chemical Reactions in Isolated and Physisorbed Stilbene Molecule*, New York, USA, June 1, 1999.
- 4.8. **Koroteev Symposium, CLEO/QELS'99, Baltimore, USA, May 27, 1999**
B. A. Grishanin and V. N. Zadkov, *Photoinduced optical rotation in a racemic mixture of hydrogen peroxide molecules*, invited talk, Baltimore, USA, May 27, 1999.
- 4.9. **Nikolai Koroteev memorial session at Italian-Russian Seminar (ITARUS'99), Moscow, February 23, 1999**
V. N. Zadkov, *Tribute to Nikolai Koroteev*, Oral talk, Moscow, February 23, 1999.
- 4.10. **Workshop on Quantum Computing and Computers, MSU, Moscow, February 7, 1999**
V. N. Zadkov, V. L. Golo, B. A. Grishanin, and V. I. Panov, *Quantum computers and quantum computing: Dreams and reality*, plenary talk, Moscow, February 7, 1999.

5. Информация о грантах, договорах, контрактах

- 5.1. Программа “Фундаментальная метрология” Миннауки РФ
- 5.2. 9/99-52м, Обработка квантовой информации с использованием атомных структур
- 5.3. МЛЦ

5.4. 48545

5.5. В ТЕОРИИ:

Одним из объектов исследования являлись т.н. лямбда-системы, которые являются прототипом для физической реализации квантовых вычислений в атомах и ионах. В простейшем случае L-система описывается тремя атомными уровнями, в которых переходы с двух нижних на верхний и обратно дипольно активны, а переход между нижними уровнями дипольно запрещен. Для такой системы удалось получить ряд новых аналитических результатов, описывающих спектральные свойства флуоресценции. Были получены также новые результаты для спектра поглощения пробного поля. Детальный анализ был проведен для описания эффектов, ответственных за формирование структуры рамановского резонанса как в модели трехуровневой системы, так и в четырехуровневой модели, существенно для тех экспериментов с парами цезия, для которых существенна роль одновременно двух возбужденных уровней. Установлен принципиально новый эффект — четырехфотонный механизм дефазировки, ответственный за принципиальный физический предел для ширины рамановского резонанса.

Другим направлением исследований было изучение эффектов, важных для создания квантово-коррелированных — так называемых “перепутанных” состояний двух атомов. В связи с этой проблемой были исследованы возможности, связанные с использованием диполь-дипольного взаимодействия сверххолодных атомов в поле специально спроектированного лазерного возбуждения. Изучены как двухуровневые модели, так и более интересная модель трехуровневых атомов, позволяющих создать квантово перепутанные долгоживущих уровней. Продолжены поиски физических механизмов, приводящих к формированию долгоживущих состояний из первоначально обладающих малым временем жизни.

В эксперименте:

Методами сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии обнаружено резонансное туннелирование, возникающее на локализованных состояниях от единичных примесных атомов и дефектов атомного масштаба и проявляющееся в виде эффектов включения и выключения резонансных каналов туннелирования.

Обнаружены и изучены эффекты размерного квантования, возникающие на поверхностных дефектах нанометровых размеров или за счет изгиба зон в области СТМ туннельного контакта на поверхности полупроводников и связанного с локальным зарядом, возникающим из-за конечного времени релаксации неравновесных носителей.

Методами СТМ/СТС обнаружены и изучены корреляционные эффекты, вызываемые интерференцией зарядов, локализованных на близлежащих дефектах и определены энергии локализованных состояний ряда единичных атомов примеси на поверхности полупроводников и их радиусы локализации. В СТМ изображениях примесных атомов на поверхности и в приповерхностных слоях полупроводников обнаружены осцилляции зарядовой плотности, зависящие от приложенного к СТМ переходу потенциала и зарядового состояния острия СТМ.

Методами СТС изучено влияние индивидуальных состояний, локализованных в области туннельного контакта нанометровых размеров, на его характеристики. Обнаружены индуцированная проводимость тонких органических пленок и резонансное туннелирование, обусловленные появлением в энергетической щели связанного локализованного состояния с энергией зависящей от расстояния между иглой СТМ и поверхностью пленки и от напряжения на туннельном переходе.

Методами низкотемпературной СТМ/СТС обнаружены осцилляции туннельной проводимости на границе сверхпроводящей щели висмутовой ВТСП керамики и предложено объяснение аномальному поведению дифференциальной туннельной проводимости высокотемпературных сверхпроводников.

Разработана методика исследования размерных эффектов в тонких пленках спиновых стекол, и обнаружены пространственные вариации туннельной проводимости, связанные с рассеянием на Кондо примесях.

- 5.1. МНТП “Лазерные и робототехнические технологии” Н.Т.415.99, Мин. Образования
- 5.2. (3/99-54)9/99-52м, Лазерная диагностика фемтосекундных процессов методами фемтосекундной спектроскопии
- 5.3. МЛЦ
- 5.4. 12000
- 5.5. Основным направлением работы было изучение сверхбыстрых процессов взаимодействия фотовозбужденных молекул с поверхностью твердого тела. Было предпринято теоретическое исследование динамики физической адсорбции молекул стильбена на поверхность высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ) и динамики фотовозбужденных молекул стильбена, адсорбированных на поверхность ВОПГ.

Изучение динамики физической адсорбции проводилось методами компьютерного моделирования с использованием развитых ранее методов расчета молекулярной динамики изолированных молекул. Была разработана оптимальная модель описания взаимодействия молекулы с подложкой, включающая динамическое описание верхнего слоя подложки. С целью контроля надежности применяемых методов была рассчитана потенциальная поверхность возбужденного состояния изолированной молекулы цис-стильбена с использованием пакета программ GAMESS и проведено ее сопоставление с потенциальной поверхностью, рассчитываемой методом молекулярной механики с использованием ранее развитой авторами проекта методики определения параметров. Сравнение подтвердило адекватность используемого подхода и выявило его практические преимущества.

В процессе моделирования динамики физической адсорбции молекулы стильбена с использованием ранее развитых методов был выявлен набор устойчивых конфигураций на поверхности. Получено семь основных равновесных конфигураций молекулы цис-стильбена в стационарном состоянии на поверхности графита и 21 симметричная им конфигурация. В отличие от изолированной молекулы, для которой торсионный угол имеет равновесное значение 4,2 град, адсорбированная молекула принимает практически плоскую конфигурацию, параллельную подложке, со значением торсионного угла 0,04 град, и располагается на расстоянии 3,3А от поверхности. Для изолированной молекулы равновесная внутренняя энергия имеет значение $U=1,6$ ккал/моль. Энергия же адсорбированной молекулы складывается из собственной энергии молекулы $U=0,4$ ккал/моль и энергии взаимодействия с подложкой $U_i=-23,9$ ккал/моль. Рассчитаны все основные углы молекулы и координаты ее расположения на поверхности графита.

Моделирование динамики фотоизомеризации показало, что взаимодействие с поверхностью качественно модифицирует характер внутримолекулярных процессов. Переход из цис- в транс-конфигурацию происходит без разворота бензольных колец, только за счет кручения этиленового мостика и синхронного смещения колец в плоскости, параллельной поверхности подложки. Было также установлено, что распределение вероятностей между каналами фотоизомеризации и распределение времен фотоизомеризации на поверхности существенно отличаются от случая изолированной молекулы. В результате анализа методом Монте-Карло были рассчитаны модифицированные воздействием поверхности вероятности всех возможных каналов фотоизомеризации. Качественная закономерность в перераспределении вероятностей состоит в возрастании относительного вклада более быстрых процессов.

Компьютерные эксперименты по динамике физической адсорбции молекул стильбена и фотоизомеризации выполнялись с использованием разработанной коллективом оригинальной методики и пакета программ, которые позволили рассчитывать процессы электронно-колебательного возбуждения молекулы лазерным импульсом и ее релаксации в основное состояние после возбуждения квантовым образом, а собственно динамику молекулы в возбужденном или основном состоянии — классически. Это дало возможность проводить расчеты молекулярной динамики возбужденной молекулы в 3N-мерном координатном пространстве и корректно описывать каналы реакций. Кроме того, данный подход позволил естественным образом дополнить модель учетом ван-дер-ваальсова взаимодействия молекулы с подложкой. По сравнению с описанными в литературе данный подход сочетает корректное описание процесса возбуждения/релаксации молекулы и метод классической молекулярной динамики, что позволяет выполнять

расчеты в 3N-мерном координатном пространстве, которые для многоатомных молекул невыполнимы при использовании полностью квантового описания.

6. Особая информация

6.1. нет

6.2. нет

6.3. Студент И.В.Баргатин был удостоен в 1997–1998 гг. стипендии им. Леонарда Эйлера (Немецкое Общество Академических Обменов, DAAD)

6.4. нет

Составители отчета:

Б. А. Гришанин, В. Н. Задков