

ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.03/30.12.2019.FM.01.09 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ
ҲУЗУРИДАГИ БИР МАРТАЛИК ИЛМИЙ КЕНГАШ

ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ

РАХМАНОВ САПАРБОЙ ЗАРИПОВИЧ

**ВАҚТГА БОҒЛИҚ ҚОПҚОНЛАРДА ВОДОРОД АТОМИДА КВАНТ
ДИНАМИКА ВА НОЧИЗИҚЛИ ОПТИК ЖАРАЁНЛАРНИ
МОДЕЛЛАШТИРИШ**

01.04.02 – Назарий физика

01.04.05 – Оптика

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

ТОШКЕНТ – 2021

Фалсафа доктори (PhD) диссертацияси автореферати мундарижаси

Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)

Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD)

Рахманов Сапарбой Зарипович

Вақтга боғлиқ қопқонларда водород атомида квант динамика ва
нечизикли оптик жараёнларни моделлаштириш

3

Рахманов Сапарбой Зарипович

Моделирование квантовой динамики и нелинейных оптических
явлений в атоме водорода в нестационарных ловушках

23

Rakhmanov Saparboy Zaripovich

Modelling of the quantum dynamics and nonlinear optical phenomena on
hydrogen atom in non-stationary traps

43

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ

List of published works.....

47

ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ
DSc.03/30.12.2019.FM.01.09 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ
ҲУЗУРИДАГИ БИР МАРТАЛИК ИЛМИЙ КЕНГАШ

ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ

РАХМАНОВ САПАРБОЙ ЗАРИПОВИЧ

**ВАҚТГА БОҒЛИҚ ҚОПҚОНЛАРДА ВОДОРОД АТОМИДА КВАНТ
ДИНАМИКА ВА НОЧИЗИҚЛИ ОПТИК ЖАРАЁНЛАРНИ
МОДЕЛЛАШТИРИШ**

01.04.02 – Назарий физика

01.04.05 – Оптика

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

ТОШКЕНТ – 2021

Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий Аттестация Комиссиясида В2020.4.PhD/FM200 рақам билан рўйхатга олинган.

Диссертация Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий Университетида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (www.nuu.uz) ҳамда «Ziynet» Ахборот-таълим порталида (www.ziynet.uz) жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:

Матрасулов Даврон Урунович

физика-математика фанлари доктори, профессор

Эшчанов Баходир Худайбергенович

физика-математика фанлари доктори

Расмий оппонентлар:

Сапаев Усман Каландарович

физика-математика фанлари доктори

Байзаков Бахтиёр Байзакович

физика-математика фанлари номзоди

Етакчи ташкилот:

Самарқанд давлат университети

Диссертация химояси Ўзбекистон Миллий университети ҳузуридаги DSc.03/30.12.2019.FM.01.09 рақамли Илмий кенгаш қошидаги Бир маргалик Илмий кенгашнинг 2021 йил «___» _____ соат _____ даги мажлисида бўлиб ўтади (Манзил: 100174, Тошкент шаҳар, Олмазор тумани, Университет кўчаси, 4 уй. Тел.: (+99871) 227-12-24, факс: (+99871) 246-53-21, 246-02-24, e-mail: nauka@nuu.uz).

Диссертация билан Ўзбекистон Миллий университетининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (___ рақами билан рўйхатга олинган). Манзил: 100174, Тошкент шаҳар, Олмазор тумани, Университет кўчаси, 4 уй. Тел.: (+99871) 227-02-24).

Диссертация автореферати 2021 йил «___» _____ куни тарқатилди.

(2021 йил «___» _____ даги _____ рақамли реестр баённомаси).



М.М. Мусаханов

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш раиси, физика-математика фанлари доктори, академик

Б.А. Файзуллаев

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш илмий котиби, физика-математика фанлари номзоди, доцент.

Б.Ж. Ахмедов

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш ҳузуридаги илмий семинар раиси, физика-математика фанлари доктори.

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертациясининг аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Жаҳон миқёсида олиб борилаётган кўплаб илмий-амалий тадқиқотлар шуни кўрсатадики, ҳозирги кунда содда атомларни турли хил қопқонларга жойлаштириш йўли орқали уларнинг квант хоссаларини бошқаришга йўналтирилган тадқиқотлар долзарбдир. Қопқон ташқи электромагнит майдон ёрдамида ҳосил қилинган ҳолатларда қопқоннинг оптик майдони билан атом таъсирлашганда юқори оптик гармониканинг генерацияси каби ночизикли оптик ҳодисалар билан тавсифланадиган ёндош жараёнларни ўрганиш ва бошқариш муҳим ҳисобланади. Чегараланган атомларда ночизикли оптик жараёнларни моделлаштириш атом физикаси, квант физикаси, замонавий ва ночизикли оптика, квант оптикаси, аттосекунд физика, лазер физикаси каби қатор соҳаларда муҳим масалаларидан бири ҳисобланади. Бунда қопқондаги атомнинг хусусиятлари эркин атомникига қараганда тубдан фарқ қилади, яъни атом электронининг физик характеристикалари қопқоннинг шакли ва ўлчамига кучли боғлиқ бўлади. Шу сабабли, қопқон ичида жойлаштирилган атом ва молекулаларда квант режимдаги ночизикли оптик ҳодисаларни ўрганиш қизиқиш уйғотади.

Жаҳонда олиб борилаётган тадқиқотларнинг кўрсатишича, стационар ва ностационар қопқон ичига жойлаштирилган атомларни ўрганиш атомнинг совуши, атом- оптик биллиардлар, фуллерен ва углерод нанотурбукалари ичидаги атом, ультраюқори босим остидаги атом хусусиятлари масалаларида муҳим ўрин эгаллайди. Бундан ташқари стационар ва вақтга боғлиқ Шредингер тенгламаси ёрдамида атом электрони тўлқинларининг хоссаларини аниқлаш ва тўлқин тенгламаларини сонли ечиш усулларини тадқиқ қилиш оптика ва квант физикасининг долзарб масалаларидан бири саналади. Амалий ва назарий тадқиқотлар шуни кўрсатадики, эркин атомларда гармоника генерация спектрининг интенсивлиги гармониканинг тартиби ортиши билан кескин камаяди. Кескин камаймайдиган спектр ва юқори қийматли интенсивлик олиш мақсадли тадқиқотлардан бири ҳисобланади.

Республикамизда фундаментал фанларнинг илмий ва амалий татбиқига эга бўлган опкита ва назарий физиканинг долзарб йўналишларига эътибор кучайтирилди. Шу жумладан, “атом+қопқон” системасини квант информатикаси ва квант технологияларида қўллашга йўналтирилган назарий тадқиқотлар ва амалий ишланмаларга алоҳида эътибор қаратилмоқда. Ностационар қопқондаги бир электронли атомларнинг квант динамикаси ва ночизикли оптик жараёнларни тадқиқ этишда, долзарб назарий ҳамда амалий масалаларни ечишда салмоқли натижаларга эришилди. “Электроника, наноматериаллар физикаси ва амалий математика” фанларининг устувор йўналишлари бўйича халқаро стандартлар даражасида илмий тадқиқотлар олиб бориш асосий вазифалар ва фаолият йўналишлари этиб белгиланди¹. Қарор ижросини таъминлашда қопқон ичидаги

¹Ўзбекистон Республикаси Вазирлар маҳкамасининг 2017 йил 18 майдаги “Ўзбекистон Республикаси Фанлар академиясининг янгидан ташкил этилган илмий тадқиқот муассасалари фаолиятини ташкил этиш тўғрисида”ги 292-сонли қарори

атом ва молекулалар масаласини ечиш назариясини ривожлантириш муҳим аҳамиятга эга.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2008 йил 15 июлдаги ПҚ-916-сон «Инновацион лойиҳалар ва технологияларни ишлаб чиқаришга татбиқ этишни рағбатлантириш борасидаги кўшимча чора-тадбирлар тўғрисида» ги, 2017 йил 17 февралдаги ПҚ-2789-сон «Фанлар Академияси фаолияти, илмий-тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш чора-тадбирлари тўғрисида» ги қарори ва 2017 йил 8 февралдаги ПФ-4947-сон «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар стратегияси тўғрисида» ги фармони ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа норматив-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги. Мазкур тадқиқот республика фан ва технологиялар ривожланишининг II. «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик» устувор йўналиши доирасида бажарилган.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Наноўлчамли қопқонлар ичига жойлаштирилган атом ва молекулалар замонавий квант механикасининг фундаментал асосларини синаш учун идеал системалар ҳисобланади. Бундан ташқари, шунга ўхшаш системалар квант компьютерларни ишлаб чиқиш, квант интерференцион ҳодисаларни ҳамда қатор бошқа квант эффектларни синаш учун асосий номзод сифатида қаралади. Шунинг учун, кейинчалик амалда қўллаш учун ўхшаш системанинг квант ҳоссаларини соzлашга имкон берувчи “атом+қопқон” квант системасининг эффектив моделларини яратиш замонавий физиканинг қатор йўналишлари кесишмасида ётувчи муҳим илмий-амалий масала ҳисобланади. Бундан ташқари, наноўлчамли қопқонлардаги атом ва молекулаларнинг квант хусусиятлари модификациясини ўрганиш ўта юқори босим остидаги модда хоссалари муаммоси учун муҳим ҳисобланади. Ўра ичида жойлаштирилган атом (atom-in-box) системасини илк тадқиқотлари ўтган асрнинг 30-йилларида А. Майкелс (A. Michels), Ж. де Боер (J. de Boer), А. Бижл (A. Bijl) ва А. Зоммерфелд (A. Sommerfeld), Х. Велкер (H. Welker) ишларида келтирилган. Ушбу тадқиқот ишларида атомга қопқон девори томонидан берилувчи юқори босимнинг таъсирини ўрганиш мақсадида тадқиқотлар ўтказилган. Кейинроқ эса, Э.П.Вигнер (E.P. Wigner) бу масалани Релей-Шредингер (Rayleigh-Schrödinger) ғалаёнланиш назарияси доирасида ўрганди ва чексиз ўра ўлчамининг лимитида натижалар эркин атомдаги натижаларга мос келмаслигини кўрсатган. Бундай системада гипер ажралиш (hyperfine splitting) масаласини Д. Сурянараяна (D. Suryanarayana), Ж.А. Вейл (J.A. Weil) лар қараб чиққан ва Э. Лей-Коо (E. Ley-Koo), С. Рубинштейн (S. Rubinstein) лар масаланинг биринчи сонли ечимини тақдим этишган. Ўра ичидаги атом системасининг ҳар томонлама ёндошувини Бурровс (Burrows) ва ҳаммуаллифларининг бир қанча ишларида учратиш мумкин. Улар системанинг хусусий қийматларини топиш учун турли хил аналитик ва сонли

методлардан фойдаланганлар. 2004- йилда Д.Р. Масович (D.R. Masovic) эса ташқи электр майдон орқали бошқариладиган ва сферик ўра ичига жойлаштирилган чегараланган водород атомининг квант динамикасини ўрганган.

Ж.П. Коннераде (J.P. Connerade) ва унинг ҳаммуаллифлари фуллерен ёрдамида ҳосил қилинган қопқонларни (атомлар учун) ўра ичига жойлаштирилган атом системасининг бошқа кўриниши деб қарашган. 2011-2012 йилларда квант заррачаларининг ҳаракатланувчи деворли қопқонлардаги хоссалари К. Накамура ва Д. Матрасуловнинг ишларида батафсил ўрганилган. 2015 йилда ностационар квант қопқонларнинг ҳосил қилиниш имкониятлари Соколовский ва унинг ҳаммуаллифлари ишларида муҳокама қилинган. Атом сатҳлари энергетик спектрининг модификацияси 2010-2017 йилларда Бурровс ва Коеннинг (Burrows and Cohen) бир қатор ишларида ўрганиб чиқилган.

Ташқи электромагнит майдон билан таъсирлашаётган ўра ичидаги атом системаси ва бундай системада оптик гармоника генерацияси учун бир неча моделларни Д.Р. Масович (D.R. Masovic) таклиф қилган, бунда ўра юқори зич муҳит (масалан, электрон газ, плазма ва бошқалар) орқали ҳосил бўлади деб ҳисобланади. У таклиф этган моделга кўра, лазернинг етарлича юқори интенсивликларида ва муҳитнинг юқори зичликларида (атомлар гуруҳидан ташкил топган) узлуксизликда электрон тўлқин пакетининг квант йўли атрофидаги бошқа атомлар (ёки ионлар) нинг майдонлари орқали ғалаёнланиши мумкин. Аммо, бундай модел стационар (қўзғалмас) деворли қопқонни кўриб чиқади. Атом хусусиятларининг модификацияси ва оптик гармоника генерацияси контекстида қопқоннинг ҳаракатланувчи деворли вазияти ҳанузгача ўрганилмаган масала бўлиб қолётган эди.

Диссертация тадқиқотининг диссертация бажарилган олий таълим муассасасининг илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Халқаро Фанлар Академияси фонди (The World Academy of Sciences (TWAS)) №15-198 RG/PHYS/AS_I – FR3240287086 ва Япониянинг Матсумае халқаро фонди № 16G14 лойиҳаларини қамраб олган ҳолда, диссертацион тадқиқот Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий Университетининг илмий тадқиқот ишлари режаси доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади стационар ва ностационар қопқон ичига жойлаштирилган атомнинг квант хоссаларини ўрганиш, тўлқин функция ва энергетик спектрнинг модификациясини аниқлаш, ташқи оптик майдон билан таъсирлашувчи қопқондаги атомда оптик гармоника генерациясини аниқлаш, “атом+қопқон” системаси учун ностационар Шредингер тенгламасини сонли усулда ечиш, бундай системада квант режимда ҳосил бўлган юқори гармоника спектрини ҳисоблашдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

Шредингер тенгламасининг ечими ёрдамида бир ўлчамли стационар ва ностационар қопқонлар ичидаги заррача ва атом электронининг тўлқин функциясини топиш;

Шредингер тенгламасининг ечими ёрдамида икки ўлчамли стационар қопқонлар ичидаги заррачанинг тўлқин функциясини топиш;

Шредингер тенгламасининг ечими ёрдамида уч ўлчамли стационар ва ностационар сферик қопқонлар ичидаги заррача ва атом электронининг тўлқин функциясини топиш;

қопқондаги заррача ва атом электронининг физик, оптик характеристикаларини турли хил қопқон параметрлари учун ҳисоблаш, жумладан, заррача ва атом электронининг ҳолат энергиялари, ўртача кинетик ва тўлиқ энергиялари, ўртача координата, ўртача дипол моменти, электронга таъсир қилувчи ўртача куч ва босими;

қопқондаги заррача ва атомга ташқи электромагнит майдон билан таъсирлашганда юзага келувчи ночизиқли оптик жараёнларни ўрганиш;

қопқоннинг турли параметрлари учун гармоника генерация спектрини ҳисоблаш;

фазовий конфайнмент мавжуд бўлганда РТ-симметрик ташқи майдон билан таъсирлашувчи квант зарралар хоссаларини моделлаштириш.

Тадқиқотнинг объекти сифатида стационар ва ностационар қопқонлар, уларнинг ичига жойлаштирилган заррача ва атомлар ҳамда чизиқли қутбланган ташқи электромагнит майдон танланган.

Тадқиқотнинг предмети ўрганилаётган системада турли хил шакл ва ўлчамли қопқонлардаги заррача ва атом электронининг квант динамикаси ва уларда ташқи электромагнит майдон таъсирида юзага келувчи оптик жараёнлар ҳисобланади.

Тадқиқотнинг усуллари. Диссертацияда чизиқли тўлқин тенгламаларининг аналитик ва сонли ечиш методлари, сонли моделлаштириш, ҳисоблаш математикаси усулларида фойдаланилган.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

ҳаракатланувчи чегарали ўра ичига жойлаштирилган водород атомининг динамикасини тавсифловчи вақтга боғлиқ чегаравий шартларга эга ностационар Шредингер тенгламасининг ечими топилган;

вақтга боғлиқ равишда радиуси узгарувчи сферик қопқон ичига жойлаштирилган заррача ва атомнинг квант динамикасини тавсифловчи вақтга боғлиқ чегаравий шартларга эга уч ўлчамли Шредингер тенгламасининг ечими топилган;

стационар қопқон учун энергетик спектр ва ҳаракатланувчи деворли сферик қопқонда деворлар ҳаракатининг турли хил (чизиқли кенгаювчи, чизиқли тораювчи ва гармоник тебранувчи) режимлар учун ундаги атом электронинг ўртача кинетик ва тўлиқ энергияларининг вақтга боғлиқлиги ҳисобланган;

ташқи электромагнит майдон таъсиридаги сферик қопқонда чегараланган атом квант динамикасини тавсифловчи ностационар Шредингер тенгламасининг ечими топилган;

сферик қопқонда ташқи оптик майдон билан таъсирлашадиган атом учун юқори гармоника генерация спектри ҳисобланган;

ташқи оптик РТ-симметрик потенциал билан таъсирлашаётган РТ-симметрик квант конфайнмент системанинг модели таклиф қилинган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари. Нано- ва субнаноўлчамли қопқонлардаги атомларнинг хоссаларини моделлаштириш квант информатикада (чигал квант ҳолатларни ва улар асосида қюбитларни ҳосил қилиш учун), квант технологияларда (алоҳида атомлар манипуляцияси асосида ишловчи наноэлектронли қурилмалар яратиш учун) ҳамда ўта юқори босимларга чидамли материаллар яратиш масаласи (масалан водород сақлаш масаласи) учун бевосита амалий қўлланилишга эга. Ушбу диссертацияда олинган илмий натижалар чигал квант ҳолатлари генерацияси учун қурилма модели сифатида хизмат қилиши мумкин. "Атом+сферик ўра" моделини юқори босим остида водородни сақлаш қурилмаси сифатида ҳам ишлатиш мумкин.

Тадқиқот натижаларининг ишончилиги шундан иборатки, сферик ғовак шаклли қопқондаги атомни моделлаштириш учун қўлланиладиган динамикалари батафсил ўрганилган ва ўта юқори босим остидаги модда хусусиятини ўрганиш доирасида кенг тан олинган. Бу ерда ушбу яқинлашиш қопқоннинг ностационар (ҳаракатланувчи) чегаралари ҳолатида умумлаштирилади. Ностационар Шредингер тенгламаларининг сонли ечими натижалари асосида тадқиқотнинг хулосалари шакллантирилган, уларнинг аниқлиги норма сақланиши билан тасдиқланган. Олинган натижалар бир қатор республика ва халқаро конференцияларда апробация қилинган.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти. Олинган натижаларнинг илмий аҳамияти шундан иборатки, диссертацияда "атом+ностационар сферик ўра" системаси учун биринчи марта қопқоннинг тезда кенгайиши пайтида атомнинг тескари уйғониши (атом электронининг уйғонган ҳолатдан асосий ҳолатга ўтиши) ҳамда гармоник тебранувчи қопқон учун атомнинг диффузион уйғониши аниқланган. Бундан ташқари, кўрсатиб ўтилганки, тебранувчи деворлари бор бўлган сферик қопқонда жойлашган атомда босимнинг бошланғич ўсиши ва кейинчалик ўсишнинг тўйиниши вақтнинг функцияси каби содир бўлади. Ташқи оптик майдон таъсирида "атом+сферик қопқон" системада юқори гармоника генерацияси модели ҳам биринчи марта таклиф қилинган.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Дельта зарбалар мавжуд бўлганда Шредингер тенгламасининг диссертацияда таклиф қилинган ечилиш методи вақт бўйича даврий ташқи майдон билан таъсирлашувчи РТ-симметрик системаларда квант зарраларнинг динамикасини моделлаштириш учун Ўзбекистон инновацион ривожланиш вазирлигининг "Тармоқланган углерод наноструктураларида квант транспорти" номли (БФ2-022) лойиҳаси доирасида қўлланилган (Ўзбекистон Физика Жамияти 21.09.2020 №3/02-11 маълумотнома) Тадқиқот натижаларидан фойдаланиш РТ- симметрик потенциал билан таъсирлашаётган заррачани тавсифловси Шредингер тенгламасининг ечимидан фойдаланган ҳолда паст ўлчамли РТ-симметрик тармоқланган углерод наноструктуралардаги квазизарраларнинг квант транспорти ҳақидаги масалани ечишга имкон берган.

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва амалий тадбиқи ҳақида Эссекс университети (Буюк Британия) ва Халифа университети (Бирлашган Араб

Амирлиги) профессори Ҳади Сузанто (Hadi Susanto) дан маълумотнома олинган.

Наноўлчамли ковакда чегараланган атомда юқори гармоника генерациясини ўрганиш натижалари хорижий журналда (European Physical Journal D Volume: 75 Issue: 6 Article Number: 166 Published: JUN 2021. Scopus, IF: 1.425) юқори тартибли гармоникаларнинг юзага келишини моделлаштиришда фойдаланилган. Бу ўз навбатида чегараланган квант системаларда юқори тартибли гармоникалар генерациясини ҳосил бўлиш механизмларини чуқурроқ тушунтириш имконини берган.

Бир ўлчамли ўрада жуфтлик алмаштириш ва вақт акслантиришга нисбатан симметрик зарбали заррача квант динамикасини ўрганиш натижалари хорижий журналларда (New Journal Of Physics Volume: 22 Issue: 10 Article Number: 103011 Published: OCT 2020. Scopus, IF: 3.729; arXiv:2103.05314v2, 2021) ноэрмитлилиқ ва квант хаос ҳамда квант локализация орасидаги боғлиқликни тушунтиришда фойдаланилган. Тадқиқот натижаларидан фойдаланиш ноэрмитлилиқ ва хаос орасидаги боғлиқликни кўрсатиш ҳамда РТ-симметрик системада зарба параметрининг қайсидир қийматидан бошлаб РТ-симметрикликнинг бузилишини кўрсатиш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Тадқиқотларнинг асосий натижалари 9 та, шу жумладан, 5 та халқаро ва 4 та республика илмий-амалий анжуманларида маъруза кўринишида баён қилинган. Бундан ташқари Германиянинг Геиделберг шаҳрида Макс Планк номидаги Ядро Физикаси институтида (MPI for Nuclear Physics), Гамбург шаҳрида Макс Планк номидаги “Модда Структураси ва Динамикаси” институтида (MPI for the Structure and Dynamics of Matter) ва Йена шаҳрида Гелмголтз институтида илмий маъруза қилинган. Италиянинг Триесте шаҳрида халқаро назарий физика маркази (International Center of Theoretical Physics (ICTP)) да постер шаклда тақдимот қилинган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги. Диссертация мавзуси бўйича жами 14 та илмий иш чоп этилган, шулардан Ўзбекистон Республикаси Олий Аттестация Комиссияси томонидан фалсафа доктори (PhD) диссертацияларининг асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларида 5 та мақола хорижий журналларда нашр этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулосалар ва фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг ҳажми 121 бет, шундан 12 бети адабиётлар рўйхатини ўз ичига олади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг Ўзбекистон Республикаси илм-фан ва технологияларни ривожлантиришнинг устувор йўналишларига мос ҳолда долзарблиги ва зарурияти асосланган. Диссертация ишининг мақсад ва вазифалари шакллантирилган, тадқиқот объекти ва предмети кўрсатилган,

тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён этилган. Олинган натижаларнинг ишончлилиги асосланган, уларнинг назарий ва амалий аҳамияти очиқланган. Тадқиқот натижаларининг амалга жорий этилиши, нашр қилинганлик даражаси ва диссертация ишининг структураси келтириб ўтилган.

Диссертациянинг **“Квант режимида атомларнинг ташқи майдонлар билан таъсирлашаётган пайтдаги ночизиқли оптик жараёнлар”** номли биринчи бобида ташқи электромагнит майдондаги атом, электромагнит майдонлар билан таъсирлашаётган атомларда оптик гармоника генерацияси ва аттосекунд давомийликдаги жараёнлар батафсил таҳлил қилинган. Бундай жараёнлар назарияси асослари ҳам қисқача баён қилинган. Бу соҳада бошқа олимлар томонидан олинган илмий натижалар келтирилган.

“Ностационар ўраларда водород атомининг квант динамикаси” номли иккинчи боб конфайнмент динамикаси остидаги водород атомининг бир ўлчамли моделини, стационар сферик-симметрик ўрадаги атом ва ностационар радиусли сферик ўрадаги атом динамикасини ўрганишга бағишланган.

r_0 радиусли ўтказмайдиган деворларга эга сферик ўрада чегараланган водородсимон (бир электронли) атомни қараймиз. Фараз қиламизки, атомнинг ядроси ўра марказида фиксирланган, бундай системада атом электронининг динамикаси учун бизда қуйидагича берилган стационар радиал Шредингер тенгламаси бор (атом бирликлардан, $m_e = \hbar = e = 1$ фойдаланилган):

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right] R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r), \quad (1)$$

бунда R_{nl} тўлқин функциянинг радиал қисми, Z ядронинг заряди, n ва l мос равишда асосий ва орбитал квант сонлари. E_{nl} энергия хусусий қийматлар $R_{nl}(r)$ учун чегаравий шартдан топиш мумкин:

$$R_{nl}(r) |_{r=r_0} = 0. \quad (2)$$

Биз $r_0 = r_0(t)$ орқали берилган вақтга боғлиқ радиус билан сферик ўрада чегараланган атомни қараб чиқамиз. Бу ҳолда, сфера кенгайиш (торайиш) давомида унинг шакли ўзгармай қолади, шунинг учун, марказий симметрия бузилмайди. Шу сабабли, агар атом ядроси сферанинг марказида фиксерланса, электрон динамикаси қуйидаги берилган вақтга боғлиқ радиал Шредингер тенгламаси орқали тавсифланади:

$$i \frac{\partial R(r, t)}{\partial t} = \hat{H} R(r, t), \quad (3)$$

бунда

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r}.$$

(3) тенглама учун чегаравий шартлар куйидагидек жорий қилинади:

$$R(r, t) |_{r=r_0(t)} = 0.$$

(3) тенгламани ечишда чегаравий шартларни вақтга боғлиқ бўлмаган (статик) формага алмаштириш керак бўлади. Бу куйидагидек янги координата, y орқали қилинади:

$$y = \frac{r}{r_0(t)},$$

ва тўлқин функциянинг алмаштиришидан фойдаланиб,

$$R(y, t) = \frac{1}{r_0(t)^{3/2} y} e^{i \frac{r_0(t) \dot{r}_0(t)}{2} y^2} \Phi(y, t),$$

куйидагича аниқланувчи янги вақт ўзгарувчини киритиб,

$$\tau = \int_0^t \frac{ds}{r_0(s)^2},$$

$\Phi(y, t) |_{y=1} = 0$ чегаравий шартга эга бўлган тенгламани оламиз:

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \left(\frac{1}{2} r_0^3 \ddot{r}_0 y^2 + \frac{l(l+1)}{2y^2} - \frac{Z r_0}{y} \right) \Phi. \quad (4)$$

(4) тенгламани MATLAB дастуридан фойдаланиб, сонли ечиш орқали ўра девори ҳаракатининг турли хил режимлари учун атом электронининг ўртача кинетик ва тўлиқ энергияси ҳамда координатаси, электронга таъсир қилувчи ўртача куч ва босим ҳисобланди. Биз ўра деворининг уч хил режимини, яни чизиқли кенгаювчи, чизиқли тораювчи ва гармоник тебранувчи ҳолларини қарадик.

Атом электронининг кузатиладиган муҳим физик характеристикаси куйидагидек аниқланадиган унинг ўртача тўлиқ энергияси

$$\langle E(t) \rangle = 4\pi \int_0^{r_0(t)} R^*(r, t) \left(-\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right) R(r, t) r^2 dr,$$

ва куйидагича берилган ўртача кинетик энергиясидир

$$\langle E(t) \rangle = 4\pi \int_0^{r_0(t)} R^*(r, t) \left(-\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right) R(r, t) r^2 dr.$$

Вақтга боғлиқ ўра ичидаги атом электронининг хусусияти учун масъул ҳаракатланувчи девор орқали атом электронига таъсир қилувчи ўртача куч ва бу куч орқали юзага келувчи босим муҳим характеристикалари ҳисобланади. Вақтга боғлиқ ўра учун куч оператори қуйидагича берилган:

$$\hat{F} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial r_0(t)}.$$

Ўртача куч қуйидагидек ҳисобланиши мумкин:

$$\langle F(t) \rangle = -\frac{\partial}{\partial r_0(t)} \langle R(r, t) | \hat{H} | R(r, t) \rangle.$$

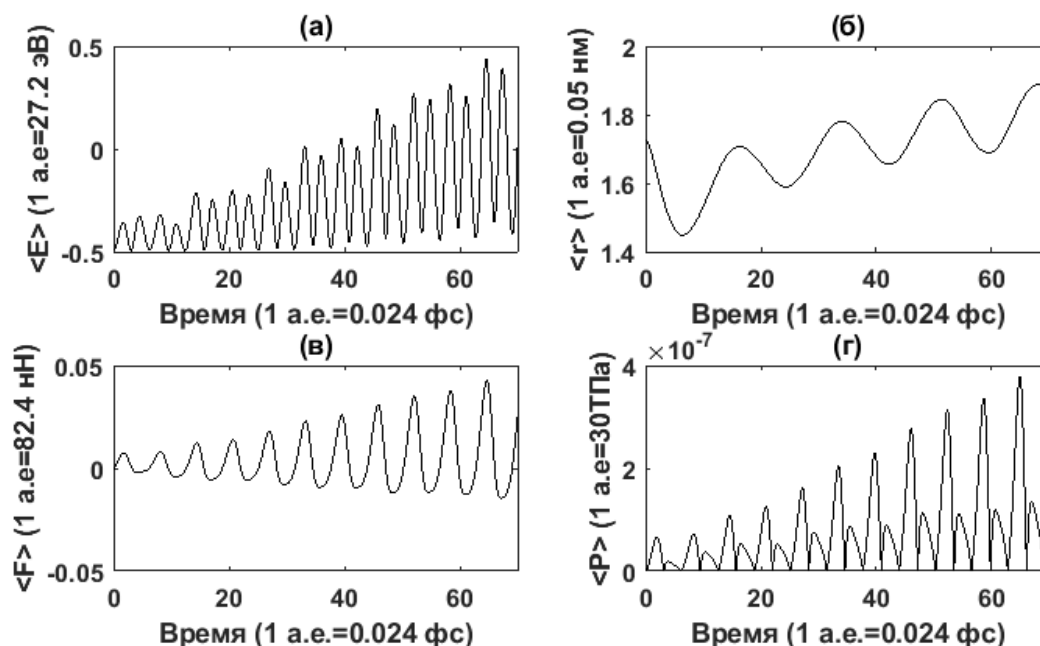
бунда $R(r, t)$ (3) тенглама орқали аниқланган вақтга боғлиқ ўра ичидаги атом электронининг тўлқин функцияси.

Ҳаракатланувчи девор орқали атомда пайдо бўлган ўртача босим қуйидагидек ёзилади:

$$\langle P(t) \rangle = \frac{\langle F(t) \rangle}{4\pi r_0^2(t)}.$$

Қуйидаги 1-расмда ўртача тўлиқ энергия, координата, гармоник тебранувчи ўра учун девор томонидан атом электронига таъсир қилувчи ўртача куч ва босимнинг вақтга боғлиқлик графиклари келтирилган. Расмдан кўринадики, тебраниш амплитудасининг юқори қийматларида атом электронининг тебранувчи девор билан таъсири диффузион уйғонишга олиб келади, яъни ўртача тўлиқ энергия ўсади ва етарлича давомли вақтдан сўнг мусбат бўлади. Бундай ўсиш ўртача куч ва босимнинг вақтга боғлиқлигида ҳам намоён бўлади. Бу режимда ўртача координатанинг (тебранишлар билан борадиган) чизикли ўсиши кузатилади.

Шундай қилиб, тебраниш амплитудасининг «критик» қиймати (бизнинг ҳолда тахминан 0,6 нм) мавжуд, унда ўртача тўлиқ энергия бир қанча вақт давомида ўз ишорасини ўзгартиради. Тушунарлики, ўра деворининг тебраниши атомга энергия киритилишига олиб келади, бу ўз навбатида унинг диффузион уйғонишига сабаб бўлади. Бошқача айтганда, тебранувчи деворли ўрадаги атом ўзини олдинроқ хаотик (диффузион) ионлашиш контекстида чуқур ўрганилган монохроматик майдондаги каби тутади. Бундай модел вақтга боғлиқ ҳолда ҳолатини ўзгартирувчи зич фокусланган лазер нури билан ҳосил қилинадиган тебранувчи деворли атом оптик биллиардда амалга ошиши мумкин.



1- расм: Ўртача тўлиқ энергия (а), координата (б), гармоник тебранувчи ўра учун девор томонидан атом электронига таъсир қилувчи ўртача куч (в) ва босим (г) нинг вақтга боғлиқлиги ($a=5$ нм, $b=0.75$ нм, $\omega = 26 \cdot 10^{16}$ сек $^{-1}$).

“Ностационар ўраларда оптик гармоника генерация” номли учинчи бобда ностационар ўрадаги зарра квант динамикасини, ностационар ўрадаги электрон газ ва водород атомида юқори гармоника генерация масалалари қаралган.

Ўнг деворининг ҳолати вақтга боғлиқ функция, $L(t)$ орқали берилган ҳаракатланувчи девор билан бир ўлчамли ўрада чегараланган квант заррачасини қараймиз. Бундай заррачанинг динамикаси қуйидагидек вақтга боғлиқ Шредингер тенгламаси орқали бошқарилади:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (5)$$

Бу тенглама учун чегаравий шартлар қуйидагидек жорий қилинади:

$$\psi(x, t) |_{x=0} = \psi(x, t) |_{x=L(t)} = 0 \quad (6)$$

Тенглама (5) ни ечишда, чегаравий шартларни вақтга боғлиқ бўлмаган (статик) формага алмаштириш керак бўлади. Бу қуйидагидек янги координата, y орқали қилинади:

$$y = \frac{x}{L(t)},$$

ва тўлқин функциянинг алмаштиришидан фойдаланиб,

$$\psi(y, t) = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{\frac{i}{2} L(t) \dot{L}(t) y^2} \varphi(y, t),$$

қуйидаги берилган вақт ўлчови билан биргаликда,

$$\tau = \int_0^t \frac{ds}{L(s)^2},$$

Биз тенглама (5) ни қайтадан ёзамиз:

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{1}{2} L^3 \ddot{L} y^2 \varphi. \quad (7)$$

$L(t)$ нинг ихтиёрий вақтга боғлиқлиги учун масала фақат сонли ечилиши мумкин.

Системада динамик чегараланиш конфайнментнинг манбаи сифатида оптик майдондан фойдаланиб амалга оширилади. Бундай системаларнинг типик вариантлари оптик биллиардлар ва оптик твизерлар ҳисобланади. Атом оптик биллиардларда, тез сканерланадиган ва кучли фокусланган лазер нури чегараланган заррачалар учун вақт ўртачаланган квази-статик потенциал ҳосил қилади. Лазер нурининг оғиш бурчакларини бошқариш орқали турли хил шаклдаги ўралар (биллиардлар) ҳосил қилиш мумкин. Оптик твизерларда, кучли фокусланган лазер нурининг радиация босими атомлар ва субатом ўлчамли заррачалар учун динамик қопқон ҳосил қила олади. Соҳанинг заррачалари билан (чегараланган) оптик майдоннинг таъсири гармоника генерацияни ўз ичига олган турли хил ночизикли оптик жараёнларни келтириб чиқариши мумкин. Юқоридаги (7) тенглама орқали тавсифланадиган виртуал системанинг потенциал қисмини монохроматик майдон формасида қуйидагича ёзиш мумкин:

$$V(y, t) = \frac{1}{2} L^3 \ddot{L} y^2 = F \cos \omega \tau y^2 \quad (8)$$

Шу сабабли, виртуал система квант ўра ва квадратик (ночизикли) қутбланган монохроматик майдон орқали бошқарилади деб қараш мумкин. Биз (7) ва (8) тенгламалар орқали тавсифланадиган системада оптик юқори гармоника генерацияни ўрганишга эътибор қаратамиз. Бу ерда биз оптик гармоника генерацияда чегараланишнинг ролига эътибор қаратамиз. Бундай жараённинг асосий физик характеристикаси қуйидагича берилган ўртача дипол моментиدير:

$$\bar{d}(t) = - \langle \psi(x, t) | x | \psi(x, t) \rangle$$

Гармоника генерациянинг спектри қуйидагича ҳисобланади:

$$|d(\omega)|^2 = \left| \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i\omega t} \bar{d}(t) dt \right|^2 \quad (9)$$

бунда T таъсирлашишнинг умумий давомийлиги.

r_0 радиусли ўтказмайдиған деворларга эга сферик ўрада чегараланган Z ўқи бўйлаб тарқалаётган частотаси ω_0 ва кучи F бўлган ташқи чизиқли кутбланган монохроматик майдон орқали бошқариладиган водородсимон атомни қараб чиқамиз. Фараз қиламизки, атомнинг ядроси ўра марказида фиксирланган, бундай системада атом электронининг динамикаси учун бизда куйидагича берилган ностационар Шредингер тенгламаси бор:

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + V) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (10)$$

бунда

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r}$$

ва

$$V = -Fz \cos(\omega_0 t)$$

Бундай режимда (10) тенглама учун чегаравий шартлар куйидагидек жорий қилинади:

$$\Psi(r_0, t) = 0$$

ва бошланғич шарт сферик ўрадаги водородсимон атом электронининг асосий ҳолатидир. (10) тенгламани ечишда, куйидагидек ғалаёнланмаган сферик ўра хусусий функциясининг тўплами орқали ечимларни ёйиш керак бўлади:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{nlm} C_{nlm}(t) u_{nlm}(\mathbf{r}, t) \quad (11)$$

бунда $u_{nlm}(\mathbf{r})$ стационар Шредингер тенгламасидан топиладиган сферик ўрада чегараланган квант заррачанинги хусусий функциясидир.

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] u_{nlm}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{nl} u_{nlm}(\mathbf{r}) \quad (12)$$

Бунда сферик симметрия мавжуд, шунинг учун (12) тенгламанинги ечимлари радиал ва бурчак қисмларга ажралади, $u_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ сферик гармоникалардир. Ўранинги радиал хусусий функциялари куйидагича ёзилади:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} j_l(\lambda_{nl} r) \quad (13)$$

бу ерда j_l сферик Бессел функциялари ва $\lambda_{nl} = \sqrt{2\varepsilon_{nl}}$. Хусусий қийматлар, ε_{nl} сферанинг сиртида берилган чегаравий шартдан топилади. Улар сфера сиртида сферик ўра тўлқин функциясининг нолларидир, $R_{nl}(r)|_{r=r_0} = 0$. Функция u_{nlm} қуйидаги берилган ортонормаллик шартини бажаради:

$$\int u_{n'l'm'}^* u_{nlm} d\mathbf{r} = \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

Юқори тартибли гармоника генерациясининг асосий характеристикаси ўртача дипол моменти ҳисобланади ва у генерацияланган гармоникаларнинг интенсивлигини ҳисоблаш учун фойдаланилади. Уни ўра ичидаги атом системасида гармоникалар генерацияси учун ҳам қўллаш мумкин. Дипол моменти қуйидагича берилган:

$$\bar{d}(t) = - \langle \Psi(\mathbf{r}, t) | z | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle$$

бунда $\Psi(\mathbf{r}, t)$ тўлқин функция (10) тенгламининг ечимидир. Гармоника генерациянинг спектри (9) формула орқали ҳисобланади.

Тўртинчи бобда "РТ-симметрик оптик қопқонларда заррача квант динамикаси" келтирилган бўлиб, даврий ғалаёнланган квант ўранинг бир ва икки ўлчамли моделлари масаласи ёритилган.

1998 йилда Бендер ва Боттчер ноэрмит гамилтонианли квант системалар ҳақиқий хос қийматли (ҳақиқий спектрли) хусусий ҳолатларга эга бўлиши мумкинлигини кўрсатишди. Бошқача айтганда, гамилтонианнинг эрмитлилиги унинг хос қийматлари ҳақиқийлигининг зарурий шarti ҳисобланмаслиги ва бундай гамилтонианлар асосида янги квант механика қуриш муминлиги аниқ бўлди. Қуйидаги факт бундай қуришнинг бошланғич нуқтаси ҳисобланади. Ноэрмит гамилтонианнинг хос қийматлари ҳақиқийлиги ҳолатида системанинг хос ҳолатлари учун тўлқин функцияси модули вақт бўйича сақланувчи ҳисобланади, ҳаттоки, комплекс потенциал соҳаларда ҳам. Аслида гамилтонианнинг исталган хос ҳолати учун

$$\hat{H}\psi_k = E_k\psi_k. \quad (14)$$

Тенглама (14) ни вақтга боғлиқ Шредингер тенгламасига қўйиб,

$$i \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = E_k \psi_k. \quad (15)$$

15 тенгламани оламиз. Кўриниб турибдики, исталган ҳақиқий E_k да модул ψ_k вақт бўйича сақланувчи катталиқ ҳисобланади. Аммо бундай гамилтонианнинг хос ҳолатлари ортогонал эмас ва бундай гамилтонианлар

асосида оддий билан таққослаганда ўз-ўзига кўшма квант механикасини яратиш учун скаляр кўпайтма ва нормани қайта аниқлаш талаб қилинади.

Оптикада РТ-симметрия тушунчасини қуйидагича киритиш мумкин. Икки ўлчамли ва бир ўлчамли ҳолатларда Максвел тенгламаси Гелмголтз скаляр тенгламасига келтирилади:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \varepsilon(x, z) \right) E(x, z) = 0, \quad (16)$$

Бу шаклан стационар Шредингер тенгламаси билан мос тушади;

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_k(x, z) - \frac{2m(V(x, z) - E_k)}{\hbar^2} \psi_k(x, z) = 0. \quad (17)$$

Агар $V(x, z) - E_k \rightarrow (\omega/c)^2 \varepsilon(x, z)$, $\psi_k(x, z) \rightarrow E(x, z)$ ва $-\hbar^2/(2m) \rightarrow 1$ шаклий алмаштиришларни амалга оширсак. Квант механикасида (17) тенглама орқали тавсифланадиган система учун РТ-симметриклик шarti $V(x, z) = V^*(-x, -z)$ потенциал энергияга қўйиладиган талабга келтирилганлиги сабабли, квант механикасидаги потенциал энергия ва оптикадаги диэлектрик ўтказувчанлик орасидаги ўхшашликка мувофиқ оптик системанинг РТ-симметриклик шarti муҳит диэлектрик ўтказувчанликка қўйиладиган шарт каби аниқланади:

$$\operatorname{Re} \varepsilon(\omega, x, z) = \operatorname{Re} \varepsilon(\omega, -x, -z), \quad (18a)$$

$$\operatorname{Im} \varepsilon(\omega, x, z) = -\operatorname{Im} \varepsilon(\omega, -x, -z). \quad (18b)$$

Таъкидлаш жоизки, стационар Шредингер тенгламасига вақтга боғлиқлик кирмайди. Шунинг учун, вақт акслантириш операцияси \hat{T} комплекс кўшма операцияси \hat{K} га эквивалент. Оптикада системанинг T -симметриклиги деб бундан кейин унинг K -симметриклигини тушунамиз ва (18) тенгламани қаноатлантирувчи системаларни РТ-симметрик дея номлашда давом этамиз.

Системанинг РТ-симметрик аналоги зарба потенциалига мавҳум қисмни қўшиш орқали қурилиши мумкин. Шунда зарбанинг РТ-симметрик потенциалини қуйидагича ёзиш мумкин:

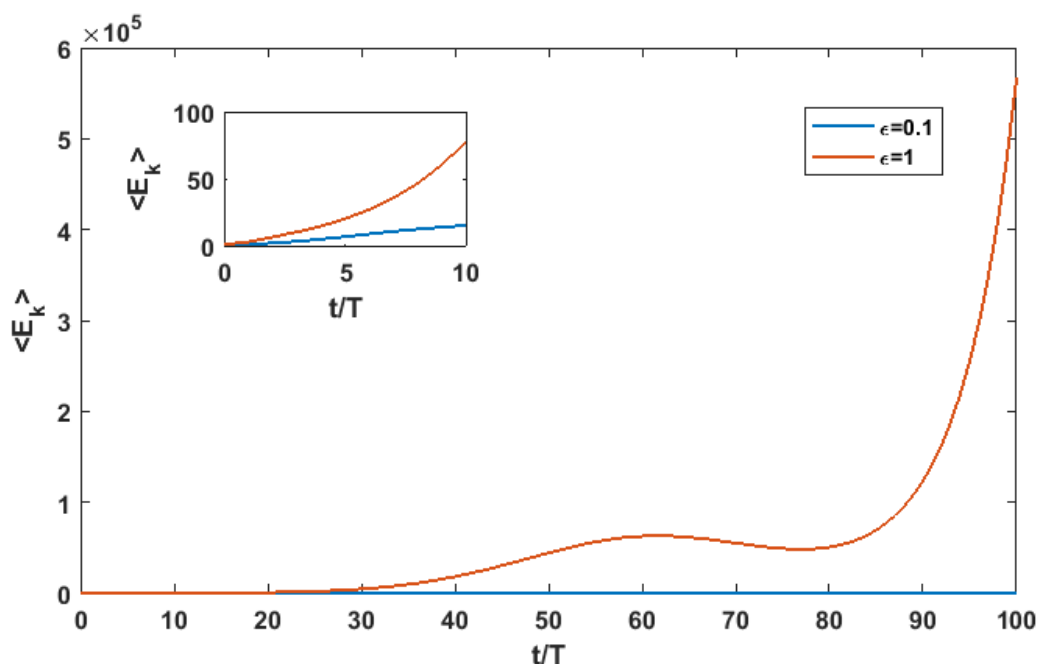
$$U_{PT}(x, t) = V(x) \sum_l \delta(t - lT), \quad (16)$$

бунда $V(x) = \varepsilon \cos(2\pi x / \mu) + i\gamma \sin(2\pi x / \mu)$, ε - зарба кучи ва T - зарба кучининг даври, $\gamma \geq 0$ зарбанинг мавҳум қисмининг кучини ўлчайдиган ноэрмит параметр.

Система динамикаси қуйидаги ностационар Шредингер тенгламаси орқали топилади

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = H_{PT} \Psi(x,t), \quad (17)$$

бунда H_{PT} -ўзида потенциалли U_{PT} мавжуд бўлган Шредингер оператори.



2- расм. $\gamma = 2,72$ эВ, $L = 0,16$ нм, $T = 0,24$ ас ва $\mu = 0,06$ нм бўлганда турли хил зарба кучлари учун ўртача кинетик энергиянинг зарбалар сони функцияси каби (ўқлардаги қийматлар атом вирликларда берилган).

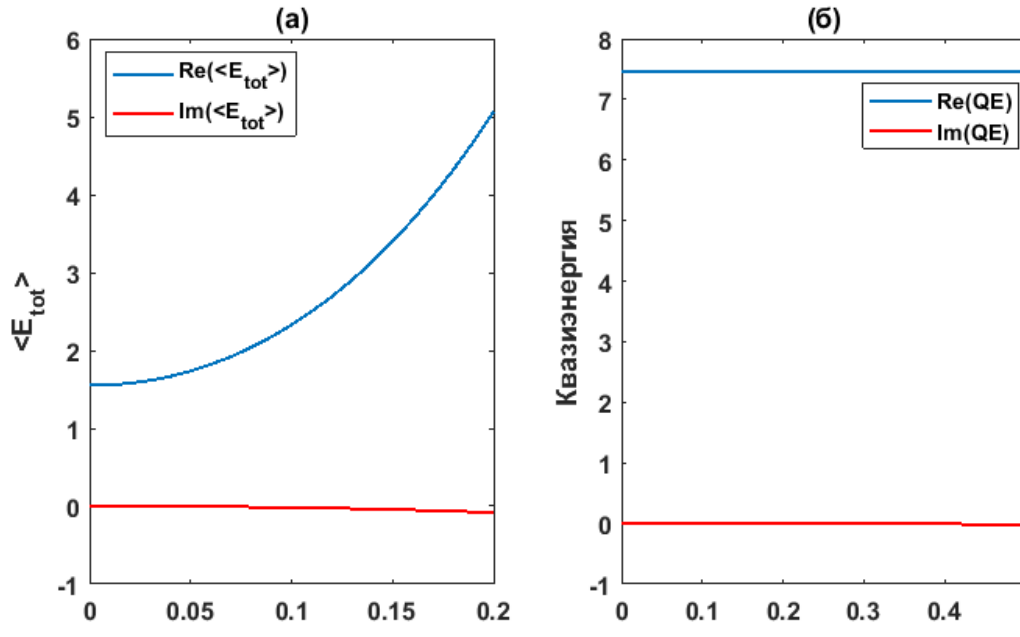
$\Psi(x,t)$ тўлқин функция ўранинг қуйидаги чегаравий шартларини қаноатлантиради:

$$\Psi(0,t) = \Psi(L,t). \quad (18)$$

Юқоридаги 2- расмда ўртача кинетик энергия вақтга боғлиқ функция сифатида тасвирланган. Гарчи, график профили эрмитли қарама-қаршилик профилига ўхшаш бўлсада, $\langle E(t)_{kin} \rangle$ нинг қиймати эрмит ҳолатдагига қараганда анча катта. Эрмит ҳолатгадига ўхшаб РТ- симметрик система учун квазиэнергетик сатҳларни U_{PT} операторнинг хос қийматлари каби ҳисоблаш мумкин.

3-расмда ўртача тўлиқ энергия (а) ва квазиэнергия (б) γ параметрнинг функцияси сифатида тасвирланган. Вақтга боғлиқ бўлмаган комплекс потенциалли РТ- симметрик системаларнинг муҳим хусусияти шуки, Гамильтониан операторнинг кутилган қиймати (энергетик сатҳлар) ҳар доим ҳақиқий ҳисобланади. Аммо вақтга боғлиқ РТ- симметрик потенциал учун вазият умуман бошқача. γ ноэрмит параметрнинг қайсидир (критик) қийматидан бошлаб ўртача квази энергия комплекс бўлади. Бу эффект РТ-симметриянинг бузилиши деб аталади. Бу ерда биз шундай эффектларни текширдик ва шуни аниқладик-ки, γ нинг қайсидир қийматидан бошлаб ўртача тўлиқ энергия ва ўртача квази-энергиянинг мавҳум қисмлари нолдан фарқли

бўлади. 3а- расмда тўлиқ энергия (координата ва вақт бўйича ўртачаланган) γ нинг функцияси сифатида келтирилганда, РТ- симметриянинг $\gamma = 0,19$ да бузилишини кузатиш мумкин. Шунга ўхшаш эффе́ктни 3б- расмда ҳам кузатиш мумкин, бунда ўртача квази-энергия γ нинг функцияси сифатида тасвирланган. РТ- симметриянинг бузилиши содир бўладиган критик қиймати зарбали РТ- симметик роторлар учун қийматидан анча кичик. Бу бизнинг системамизда чегараланишнинг натижаси бўлиши мумкин.



3- расм: $\varepsilon = 2,72$ эВ, $T = 0,24$ ас, $\mu = 0,06$ нм, $L = 0,16$ нм (а) ва $\varepsilon = 2,72$ эВ, $T = 0,24$ ас, $k = 2 \cdot 10^{10} \text{м}^{-1}$, $L = 0,5$ нм (б) учун ўртача тўлиқ энергия (а) ва квази-энергия (б) нинг γ га боғлиқлиги (ўқлардаги қийматлар атом бирликларида берилган).

Икки ўлчамли моделда ҳам ҳисоблашлар бир ўлчовлидагидек кетма-кетликда қилинади. Биллиард ичидаги заррача динамикаси қуйидаги вақтга боғлиқ Шредингер тенгламаси орқали тавсифланади:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, t) = [H_0 + V(x, y, t)] \Psi(x, y, t) \quad (19)$$

бунда $H_0 = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$ Гамильтониан ва

$V(x, y, t) = \varepsilon(\cos x + \cos y) \sum_{l=0}^{\infty} \delta(t - lT)$ икки ўлчамли делта-зарба потенциал.

Системанинг тўлқин функцияси, яъни тенглама (19) нинг ечимини қуйидагидек берилган ғалаёнланмаган биллиард тўлқин функциялари орқали ёйилади:

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{nm} A_{nm}(t) \psi_{nm}(x, y) \quad (20)$$

бунда $\psi_{nm}(x, y) = \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi y}{a}$, a квадратнинг томони.

(20) бизга ёйиш коэффициентларини аниқ ва тўғри топишга имкон беради:

$$A_{nm}(t+T) = \sum_{n'm'} A_{n'm'}(t) V_{nmn'm'} e^{-iE_{n'm'}T}$$

бунда

$$V_{nmn'm'} = \iint \psi_{nm}^*(x, y) e^{-i\varepsilon(\cos x + \cos y)} \psi_{n'm'}(x, y) dx dy$$

ва

$$E_{nm} = \frac{\pi^2}{a^2} (n^2 + m^2)$$

Бошқарилувчи системада динамиканинг муҳим характеристикаларидан бири бошқарилувчи заррачанинг ўртача кинетик энергияси саналади. Бизнинг система учун у қуйидагича аниқланади:

$$\langle E_k(t) \rangle = \iint \Psi^*(x, y, t) H_0 \Psi(x, y, t) = \sum_{nm} E_{nm} |A_{nm}(t)|^2$$

Ушбу катталиқни ҳисоблаб Ферми тезланиши, ўзаро таъсирлашмайдиган заррачадан газнинг қизиши ҳамда совуши ва шу каби қатор амалий муҳим ҳодисаларни ушбу моделда тадқиқ қилиш мумкин. Таклиф қилинаётган модел конфайнмент остидаги икки ўлчамли электрон газ ва бошқа икки ўлчамли системалар динамикасининг бошқарилувчи транспорти ва бошқаруви нуқтаи назаридан қизиқиш уйғотади.

ХУЛОСАЛАР

1. Ташқи даврий майдон билан таъсирлашувчи икки ўлчамли квадрат биллиарддаги заррачанинг ўртача кинетик энергияси вақт бўйича даврийлиги ва зарба даврининг юқори қийматларида энергиянинг амплитудаси ҳамда даври (ташқи майдон даври кичик бўлгандагига қараганда) катта қийматларга эга бўлиши кўрсатилди;
2. Биринчи марта тебраниш параметрларининг мос қийматларини танлаш орқали тебранувчи деворга эга сферик қопқондаги атом электронининг квант динамикасини манипуляциялаш мумкинлиги исботланди;
3. Биринчи марта гармоник тебранувчи деворга эга қопқонда атомнинг диффузион уйғониши ва ионизацияланиши мумкинлиги кўрсатилди;
4. Сферик қопқон радиуси тез торайганда атомда жуда юқори босим юзага келиши ва атомнинг энергетик ҳолатлари мусбат бўлиши кўрсатилди;

5. Ностационар чегараларга эга квант ўранинг оптик реализациясида квант режимда юқори оптик гармоникаларни генерациялаш мумкинлиги кўрсатилди;
6. Оптик майдон таъсири остидаги “атом+квант сферик ўра” системасида генерацияланган юқори гармоникалар интенсивлиги эркин атомдагига караганда пастроқ бўлади;
7. Биринчи марта конфайнментли РТ-симметрик квант системанинг модели мисолида ноэрмитлик параметрининг аниқ қийматлари учун бу системада РТ-симметриянинг бузилиши мумкинлиги кўрсатилди.

РАЗОВЫЙ НАУЧНЫЙ СОВЕТ
DSc.03/30.12.2019. FM.01.09
ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
ПРИ НАЦИОНАЛЬНОМ УНИВЕРСИТЕТЕ УЗБЕКИСТАНА

НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ УЗБЕКИСТАНА

РАХМАНОВ САПАРБОЙ ЗАРИПОВИЧ

МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВОЙ ДИНАМИКИ И
НЕЛИНЕЙНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В АТОМЕ
ВОДОРОДА В НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЛОВУШКАХ

01.04.02 – Теоретическая физика
01.04.05 – Оптика

АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ
ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)
ПО ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИМ НАУКАМ

ТАШКЕНТ–2021

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2020.4.PhD/FM200.

Диссертация выполнена в Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека. Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (www.nuu.uz) и на информационно-образовательном портале «Ziyonet» (www.ziyonet.uz).

Научный руководитель:

Матрасулов Даврон Урунович
доктор физико-математических наук, профессор

Эшчанов Баходир Худайбергенович
доктор физико-математических наук

Официальные оппоненты:

Сапаев Усман Каландарович
доктор физико-математических наук

Байзаков Бахтиёр Байзакович
кандидат физико-математических наук

Ведущая организация:

Самаркандский Государственный университет

Защита диссертации состоится «__» _____ 2021 года в ____ часов на заседании Разового Научного совета при Научном совете DSc.03/30.12.2019.FM.01.09 при Национальном университете Узбекистана. (Адрес: 100174, г. Ташкент, Алмазарский район, ул. Университетская, дом 4. Тел.: (+99871) 227-12-24, факс: (+99871) 246-53-21, 246-02-24, e-mail: nauka@nuu.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Национального университета Узбекистана за № __ (Адрес: 100174, г. Ташкент, Алмазарский район, ул. Университетская, дом 4. Тел.: (+99871) 227-02-24).

Автореферат диссертации разослан «__» _____ 2021 г.

(протокол реестра № __ от «__» _____ 2021 г.).



М.М. Мусаханов

Председатель Научного совета по присуждению ученых степеней, доктор физико-математических наук, академик.

Б.А. Файзуллаев

Ученый секретарь Научного совета по присуждению ученых степеней, кандидат физико-математических наук, доцент.

Б.Дж. Ахмедов

Председатель Научного семинара при научном совете по присуждению ученых степеней, доктор физико-математических наук.

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации.

Многочисленные научные и практические исследования по всему миру показывают, что в настоящее время актуальны исследования, направленные на управление квантовыми свойствами простых атомов, путем заключения их в различные ловушки. В случаях, когда ловушка создается с помощью внешних электромагнитных полей, важным является изучение и контроль сопутствующих процессов, обусловленных нелинейными оптическими явлениями, такими как возбуждение и ионизация атома, его охлаждение, а также генерация высоких оптических гармоник при взаимодействии атома с оптическим полем ловушки. Моделирование нелинейных оптических процессов в ловушках с атомами является одной из важнейших задач в таких сферах как атомная физика, физика ультрахолодных атомов, нелинейная и квантовая оптика, аттосекундная и лазерная физика. При этом свойства атомов в ловушках полностью отличаются от свойств свободного атома, то есть физические характеристики электронов атома сильно зависят от геометрической формы и размера ловушки. В связи с этим представляет интерес изучение нелинейных оптических явлений в квантовом режиме в атомах и молекулах, заключенных в ловушки.

Исследования во всем мире показали, что изучение атомов в стационарной и нестационарной квантовых ловушках играет важную роль в задачах атомного охлаждения, атомных оптических биллиардах, атома в молекулах фуллерена и углеродной нанотрубки, свойств атома под сверхвысоким давлением. Кроме того, одной из актуальных задач в оптике и квантовой физике является определение свойств волн атомного электрона и исследование численных решений волновых уравнений с помощью стационарного и зависящего от времени уравнений Шредингера. Практические и теоретические исследования показывают, что спектр генерации гармоник (интенсивность генерации гармоник) в свободных атомах резко уменьшается с увеличением порядка гармоник. Получение спектра, который не уменьшается резко, и интенсивности высокого значения являются одними из целевых исследований.

В нашей республике усилилось внимание на актуальные направления оптики и теоретической физики, которые имеют научное и практическое применение в фундаментальных науках. В том числе, особое внимание уделяется теоретическим исследованиям и практическим разработкам, направленным на использование системы “атом+ловушка” в квантовой информатике и квантовых технологиях. Значительные результаты достигнуты при исследовании квантовой динамики одноэлектронных атомов в нестационарной ловушке и нелинейно-оптических процессов и при решении актуальных теоретических и практических задач. Определены основные задачи и направления деятельности научных исследований на уровне международных стандартов в приоритетных областях в «Электроника, физика

наноматериалов и прикладная математика»². При обеспечении исполнения постановления важно развивать теорию решения задачи атомов и молекул в ловушке.

Настоящая диссертация, в определенной степени, служит осуществлению задач, обозначенных в Постановлениях Президента Республики Узбекистан №-ПП-916 «О дополнительных мерах по стимулированию внедрения инновационных проектов и технологий в производство» от 15 июля 2008 года, №-ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года и Указа Президента №-УП-4947 «О стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан» от 8 февраля 2017 года, а также в других нормативно-правовых актах по данной деятельности.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологии в Республике. Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий Республики Узбекистан – II. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение».

Степень изученности проблемы. Атомы и молекулы, заключенные в наноразмерных ловушках, являются идеальными системами для тестирования фундаментальных основ современной квантовой механики. Кроме того, подобные системы рассматриваются в качестве главных кандидатов для реализации квантовых компьютеров, тестирования квантовых интерференционных явлений, а также ряда других квантовых эффектов. геометрии ограничения в макроскопических свойствах атомных систем и т.д. Поэтому создание эффективных моделей квантовой системы «атом+ловушка», позволяющих выполнить «настройку» квантовых свойств подобной системы для ее дальнейшего практического использования, является важнейшей научно-практической задачей, лежащей на стыке ряда направлений современной физики. Кроме того, изучение модификации квантовых свойств атомов и молекул в наноразмерных ловушках является важной для проблемы поведения вещества под сверхбольшими давлениями. Первые исследования системы «атом в ящике» датируются на работах А.Майкелс (A. Michels), Ж. де Боер (J. de Boer), А. Бижл (A. Bijl), А.Зоммерфелд (A. Sommerfeld), Х. Велкер (H. Welker), опубликованных еще в 30-годах прошлого столетия, где исследования проводились с целью изучения влияния высокого давления, создаваемого стенкой ловушки на атом. Позднее Э.П.Вигнер изучил проблему в рамках теории возмущений Рэлея-Шредингера и показал, что, в пределе бесконечного размера ящика, результат не сходится к таковому для свободного атома. Д. Сурьянараяна (D.Suryanarayana), Ж.А.Вейл (J.A. Weil) рассматривали задачу сверхтонкого расщепления

¹ Постановление Кабинета Министров Республики Узбекистан от 18 мая 2017 года №292 «О мерах по организации деятельности вновь созданных научно-исследовательских учреждений академии Наук Республики Узбекистан»

(hyperfine splitting) в такой системе; Э. Лей-Кюо (E. Ley-Koo), С.Рубинштейн (S.Rubinstein) провели первое численное решение задачи. Более полную трактовку системы «атом в ящике» можно найти в серии работ Бурроуз (Burrows) и его соавторов, где авторы использовали различные аналитические и численные методы для нахождения собственных значений системы. Недавно, в 2004 году, Д.Р. Масович (D.R. Masovic) исследовал квантовую динамику атома водорода, ограниченного сферическим ящиком и управляемого внешним электрическим полем.

Ж.П. Коннерид (J.P. Connerade) и его соавторы рассматривали ловушки для атомов, созданных с помощью фуллерена как вариант системы «атом в ящике». Поведение квантовых частиц в ловушках с движущимися стенками детально изучались в работах К. Накамуры и Д. Матрасулова в 2011 -2012 гг. Возможность создания нестационарных квантовых ловушек обсуждались в работах Соколовского и соавторов в 2015 году. Модификация энергетического спектра уровней атома изучались в серии работ Бурровса и Коена (Burrows and Cohen) в 2010-2017 годах.

Что касается системы «атом в ящике», взаимодействующей с внешним электромагнитным полем и генерацией оптической гармоник в такой системе, несколько моделей были предложены Д.Р. Масовичем (D.R.Masovic), где ящик считается сформированным средой высокой плотности (например, электронным газом, плазмой и т.д.) Согласно предположениям, модель, рассмотренная Д.Р. Масовичем (D.R. Masovic), при достаточно высоких интенсивностях лазера и высоких плотностях среды (состоящей из группы атомов) квантовый путь волнового пакета электронов в непрерывности может быть возмущен полями других атомов (или ионов) в окрестности. Однако данная модель рассматривает ловушку со стационарными (неподвижными) стенками. Случай движущихся стенок ловушки в контексте модификации свойств атома и генерации оптических гармоник до сих пор оставался неизученной задачей.

Связь темы диссертации с научно-исследовательскими работами высшего учебного заведения, в котором выполняется диссертация. Диссертационное исследование выполнено по плану научно-исследовательских работ Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека, включая проекты фонда Международной академии наук (TheWorld Academy of Sciences (TWAS)) №15-198 RG/PHYS/AS_I – FR3240287086 и фонда The Matsumae International Foundation в Японии № 16G14.

Цель исследования: изучение квантовых свойств атома в ловушках, как в стационарных, так и в нестационарных, выявление модификации волновой функции и энергетического спектра, генерация оптических гармоник в атоме в ловушке при его взаимодействии с внешним оптическим полем; решение нестационарного уравнения Шредингера для системы «атом+ловушка» численными способами; расчет спектра высших гармоник, генерированных в такой системе, в квантовом режиме.

Задачи исследования:

нахождение волновой функции частицы и электрона атома в одномерных стационарных и нестационарных ловушках путем решения уравнения Шредингера;

нахождение волновой функции частицы в двухмерных стационарных ловушках решением уравнения Шредингера;

нахождение волновой функции частицы и электрона атома в трехмерных стационарных и нестационарных сферических ловушках решением уравнения Шредингера;

вычисление физических и оптических характеристик частицы и электрона атома в ловушке для различных параметров ловушки, таких как энергия состояния, средняя кинетическая и полная энергия, средняя координата, средний дипольный момент частицы и электрона атома, средняя сила и давление, действующие на атом;

изучение нелинейных оптических процессов при воздействии на частицу и атом в ловушке внешнего электромагнитного поля;

вычисление спектра генерации гармоник для различных параметров ловушки;

моделирование поведения квантовой частицы, взаимодействующей с РТ-симметричным внешним полем при наличии пространственного конфайнмента.

Объектом исследования являются стационарные и нестационарные ловушки, частицы и атомы в них, линейно-поляризованное внешнее электромагнитное поле.

Предметом исследования являются квантовая динамика частицы и электрона атома в ловушках различных форм и размеров в изучаемой системе, а также оптические процессы под воздействием внешнего электромагнитного поля.

Методы исследования. В диссертации использованы методы аналитического и численного решения линейных волновых уравнений, численное моделирование, методы вычислительной математики.

Научная новизна диссертационного исследования следующая:

получено решение нестационарного одномерного уравнения Шредингера с зависящими от времени граничными условиями, описывающего динамику одномерного атома водорода в ящике с движущимися границами;

получено решение нестационарного трехмерного уравнения Шредингера с зависящими от времени граничными условиями, описывающего квантовую динамику атома в сферической ловушке с меняющимся по времени радиусом;

рассчитаны энергетический спектр (для стационарной ловушки), временная зависимость средней кинетической и полной энергий электрона атома в сферической ловушке с движущимися стенками для различных режимов движения стенок: линейно расширяющейся, линейно сжимающейся и гармонически дышащей сфер;

получено решение нестационарного уравнения Шредингера, описывающего квантовую динамику атома в сферической ловушке, взаимодействующего с внешним электромагнитным полем;

для атома в сферической ловушке, взаимодействующего с внешним оптическим полем, рассчитан спектр генерации высших гармоник в квантовом режиме атома внутри ловушки;

предложена модель РТ-симметричной квантовой системы confinement, взаимодействующей с внешним оптическим РТ-симметричным потенциалом.

Практические результаты исследования. Моделирование поведения атомов в нано- и субнано-размерных ловушках имеет непосредственное практическое применение в квантовой информатике (для создания запутанных квантовых состояний и любитов на их основе), квантовых технологиях (для создания нанoeлектронных устройств, функционирующих на основе манипуляции отдельными атомами), а также для проблемы создания материалов, устойчивых при сверхвысоких давлениях (например, для проблемы хранения водорода). Результаты, полученные в данной диссертации, могут служить моделью устройства для генерации запутанных квантовых состояний. Также модель «атом+сферический ящик» можно использовать как устройство для хранения водорода под высоким давлением.

Достоверность результатов исследований заключается в том, что применяемые для моделирования динамики атома в ловушке в виде сферической полости ранее детально изучались и находили широкое признание в контексте изучения поведения вещества под сверхвысокими давлениями. Здесь данный подход обобщается на случай нестационарных (движущихся) границ ловушки. Выводы работы сделаны на основе результатов численного решения нестационарного уравнения Шредингера, корректность которых подтверждается сохранением нормы. Полученные результаты были апробированы на ряде республиканских и международных конференций.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научная значимость полученных результатов состоит в том факте, что в диссертации для системы «атом+нестационарный сферический ящик» впервые было выявлено де-возбуждение (переход атомного электрона от возбужденного состояния в основное) атома при быстром расширении ловушки, а также диффузионное возбуждение атома для гармонически «дыщащей» ловушки. Кроме того, показано, что в атоме, находящемся в сферической ловушке с осциллирующими стенками, происходит первоначальный рост и последующее насыщение роста давления (на атом) как функции времени. Также впервые предложена модель генерации высших гармоник в системе «атом+сферическая ловушка» под воздействием внешнего оптического поля.

Внедрение результатов исследования. Предложенный в диссертации метод решения уравнения Шредингера при наличии дельта-толчков использовался (внедрен) для моделирования динамики квантовых частиц в РТ-симметричных системах, взаимодействующих с периодическими по времени внешними полями в рамках гранта Министерства Инновационного Развития Узбекистана под названием «Квантовый транспорт в разветвленных

углеродных наноструктурах» (БФ2-022) (справка Общества Физики Узбекистана от 21.09.2020 № 3/02-11). Применение результатов исследования позволило решить задачу о квантовом транспорте квазичастиц в РТ-симметричных сетеподобных углеродных наноструктурах низкой размерности, используя решение уравнения Шредингера, описывающее частицу, взаимодействующую с РТ-симметричным потенциалом;

Справка о значимости и практическом применении темы диссертации была получена от Хади Сусанто (Hadi Susanto), профессора Университета Эссекса (Великобритания) и Университета Халифа (Объединённые Арабские Эмираты).

Результаты изучения генерации высших гармоник в атоме, заключенном в наноразмерной ловушке, были использованы в иностранном журнале (European Physical Journal D Volume: 75 Issue: 6 Article Number: 166 Published: JUN 2021. Scopus, IF: 1.425) при моделировании генерации высоких гармоник, что позволило глубже объяснить механизмы генерации высоких гармоник в квантовых системах с конфайнментом.

Результаты изучения в одномерной ловушке квантовой динамики частицы с толчками, которая симметрична относительно четности и обращения времени, были использованы в иностранных журналах (New Journal Of Physics Volume: 22 Issue: 10 Article Number: 103011 Published: OCT 2020. IF: 3.729; arXiv:2103.05314v2, 2021) для объяснения связи между неэрмитовостью и квантовым хаосом и квантовой локализацией. Применение научных результатов позволило выявить связь между РТ-симметрией и хаосом, а также показать нарушение РТ-симметрии, начиная с определенных значений силы толчка в РТ-симметричной системе.

Апробация результатов исследования. Основные результаты исследований были апробированы на 9 научно-практических конференциях, в том числе на 5 международных и 4 республиканских научно-практических конференциях в виде докладов. Кроме того, были проведены научные лекции в Институте ядерной физики им. Макса Планка (MPI for Nuclear Physics) в Гейдельберге, Германия, в Институте структуры и динамики вещества им. Макса Планка (MPI for the Structure and Dynamics of Matter) в Гамбурге и в Институте Гельмгольца в Йене. Представлены в виде плаката в Международном центре теоретической физики (International Center of Theoretical Physics (ICTP) в Триесте, Италия.

Публикация результатов исследования. По теме диссертации опубликовано 14 научных работ. Из них 5 научных статей в зарубежных журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторской диссертации.

Структура и объем диссертации. Структура диссертации состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 121 страницы, из них 12 страниц занимает список использованной литературы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность и востребованность темы диссертации в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан. Сформулированы цель и задачи диссертации, указаны объект и предмет исследования, изложены научная новизна и практические результаты исследования. Обоснована достоверность полученных результатов, раскрыта теоретическая и практическая значимость полученных результатов. Приведены перечень внедрений в практику результатов исследования, сведения об опубликованных работах и структура диссертации.

В первой главе диссертации, названной «**Нелинейные оптические явления при взаимодействии атомов с внешними полями в квантовом режиме**» были подробно представлены атом во внешнем электромагнитном поле, аттосекундные процессы и оптическая генерация гармоник в атомах, взаимодействующих с внешними электромагнитными полями. Были также кратко изложены основы теории таких процессов. Были приведены научные результаты, полученные другими учеными.

Вторая глава «**Квантовая динамика атома водорода в нестационарных ловушках**» посвящена изучению одномерной модели атома водорода под динамическим конфайнментом, атома в стационарной сферически-симметрической ловушке и динамике атома в сферической яме с нестационарным радиусом.

Рассмотрим водородоподобный (одноэлектронный) атом, заключенный в сферическом ящике с непроницаемыми стенками с радиусом r_0 . Предполагая, что ядро атома зафиксировано в центре прямоугольника, для динамики атомного электрона в такой системе имеем стационарное радиальное уравнение Шредингера, которое задается как (здесь используются атомные единицы $m_e = \hbar = e = 1$):

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right] R_{nl}(r) = E_{nl} R_{nl}(r), \quad (1)$$

где R_{nl} - радиальная часть волновой функции, Z - заряд ядра, n и l - главные и орбитальные квантовые числа, соответственно. Собственные значения энергии E_{nl} можно найти из граничного условия для $R_{nl}(r)$:

$$R_{nl}(r)|_{r=r_0} = 0. \quad (2)$$

Здесь рассматривается атом, заключенный в сферический ящик с изменяющимся во времени радиусом, определяемым формулой $r_0 = r_0(t)$. В этом случае сфера сохраняет свою форму во время расширения (сжатия), поэтому центральная симметрия не нарушается. Следовательно, если ядро атома зафиксировано в центре сферы, динамика электронов описывается

нестационарным радиальным уравнением Шредингера, которое определяется как

$$i \frac{\partial R(r,t)}{\partial t} = \hat{H}R(r,t), \quad (3)$$

где

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r}.$$

Граничные условия для уравнения (3) накладываются в виде

$$R(r,t)|_{r=r_0(t)} = 0.$$

Для решения уравнения (3) необходимо привести граничные условия в не зависящую от времени (статическую) форму. Это можно сделать с помощью следующей новой координаты y :

$$y = \frac{r}{r_0(t)}.$$

и с помощью преобразования волновой функции

$$R(y,t) = \frac{1}{r_0(t)^{3/2} y} e^{\frac{i}{2} r_0(t) \dot{r}_0(t) y^2} \Phi(y,t).$$

Введением новой переменной времени, определенной как

$$\tau = \int_0^t \frac{ds}{r_0(s)^2},$$

получаем уравнение, имеющее граничное условие $\Phi(y,t)|_{y=1} = 0$

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial \tau} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \left(\frac{1}{2} r_0^3 \ddot{r}_0 y^2 + \frac{l(l+1)}{2y^2} - \frac{Zr_0}{y} \right) \Phi. \quad (4)$$

Путем численного решения уравнения (4) с использованием программы MATLAB были рассчитаны средняя кинетическая, полная энергия и координата электрона атома для различных режимов движения стенки ящика, а также средняя сила и давление, действующие на электрон. Мы рассматривали 3 различных режимов движения стенки: линейно-расширяющейся, линейно - сжимающийся и гармонически колеблющийся. Важными физически наблюдаемыми характеристиками атомного электрона являются его средняя полная энергия, которая определяется как

$$\langle E(t) \rangle = 4\pi \int_0^{r_0(t)} R^*(r, t) \left(-\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right) R(r, t) r^2 dr,$$

и средняя кинетическая энергия, определяемая как

$$\langle E(t) \rangle = 4\pi \int_0^{r_0(t)} R^*(r, t) \left(-\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right) R(r, t) r^2 dr.$$

Важными характеристиками, ответственными за поведение атомного электрона в зависящем от времени ящике, являются средняя сила, действующая на атомный электрон движущейся стенкой, и давление, вызванное этой силой. Оператор силы для зависящего от времени ящика задается как

$$\hat{F} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial r_0(t)}.$$

Средняя сила может быть рассчитана как

$$\langle F(t) \rangle = -\frac{\partial}{\partial r_0(t)} \langle R(r, t) | \hat{H} | R(r, t) \rangle.$$

где $R(r, t)$ - волновая функция атомного электрона в зависящем от времени ящике, определяемая уравнением (3).

Тогда среднее давление на атом, создаваемое движущейся стенкой, можно записать в виде

$$\langle P(t) \rangle = \frac{\langle F(t) \rangle}{4\pi r_0^2(t)}.$$

Ниже на рисунке 1 приведены графики зависимости от времени средней полной энергии, координаты, средней силы и давления, действующих на атомный электрон со стороны стенки для гармонически дышащего ящика. Как видно из рисунка, для более высоких амплитуд колебаний, взаимодействие атомного электрона с дышащей стенкой приводит к диффузионному возбуждению, т.е. средняя полная энергия растет и становится положительной через достаточно продолжительное время. Подобный рост демонстрирует среднюю силу и давление в зависимости от времени. В этом режиме наблюдается линейный рост (сопровожаемый колебаниями) средней координаты. Таким образом, существует "критическое" значение (примерно 0.6 нм в нашем случае) амплитуды дыхания, при котором средняя полная энергия меняет свой знак в течение некоторого времени. Понятно, что колебание стенки ящика приводит к накачке энергии в атом, который вызывает его диффузионное возбуждение. Другими словами, атом в ящике с осциллирующими стенками ведет себя так же, как в монохроматическом поле,

широко изученном ранее в контексте хаотической (диффузионной) ионизации. Такая модель может быть реализована в атомно-оптическом билиарде, где осциллирующие границы билиарда могут создаваться плотно сфокусированным лазерным лучом с изменяющимся во времени положением.

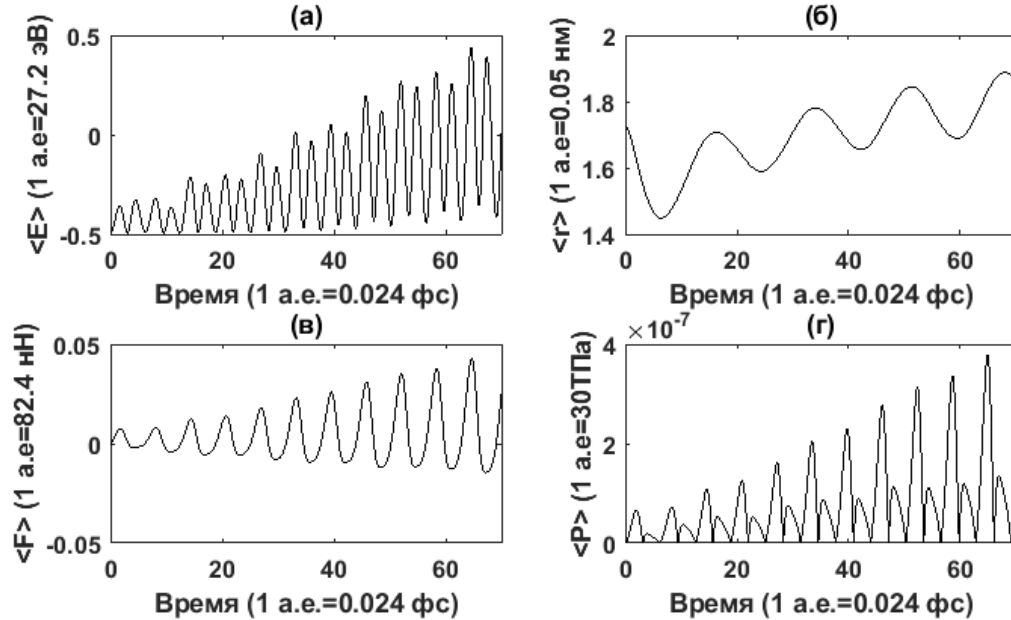


Рисунок 1: Зависимость от времени средней полной энергии (а), координаты (б), средней силы (в) и давления (г), действующих на атомный электрон со стороны стенки для гармонически дышащего ящика ($a = 5$ нм, $b = 0,75$ нм, $\omega = 26 \cdot 10^{16}$ сек $^{-1}$).

В третьей главе «Генерация оптических гармоник в нестационарных ловушках» рассмотрены задачи квантовой динамики частицы в нестационарном ящике, генерация высших гармоник электронным газом и атомом водорода в нестационарном квантовом ящике.

Рассмотрим квантовую частицу, ограниченную одномерным ящиком с движущейся (правой) стенкой, где положение правой стенки задается зависящей от времени функцией $L(t)$. Динамика такой частицы определяется нестационарным уравнением Шредингера, определяемым

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (5)$$

Граничные условия для этого уравнения налагаются как

$$\psi(x, t) |_{x=0} = \psi(x, t) |_{x=L(t)} = 0 \quad (6)$$

Для решения уравнения (5) необходимо преобразовать граничные условия в независимую от времени (статическую) форму. Это можно сделать с помощью новой координаты y :

$$y = \frac{x}{L(t)},$$

и используя преобразование волновой функции

$$\psi(y, t) = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{i L(t) L(t) y^2} \varphi(y, t),$$

вместе с нижеприведенным масштабированием времени

$$\tau = \int_0^t \frac{ds}{L(s)^2},$$

можем переписать уравнение (5) как

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{1}{2} L^3 \ddot{L} y^2 \varphi. \quad (7)$$

Для произвольной зависимости $L(t)$ от времени задача может быть решена только численно.

Динамическое ограничение в системе может быть реализовано с использованием оптического поля в качестве источника конфайнмента. Типичными версиями таких систем являются атомно-оптические бильярды и оптические твизеры. В атомно - оптических бильярдах, быстро сканирующий и четко сфокусированный лазерный луч создает усредненный по времени квазистатический потенциал для ограниченных частиц. Управляя углами отклонения лазерного луча, можно создавать ящик (бильярд) различной формы. В оптических твизерах радиационное давление от высоко-сфокусированного лазерного луча способно создать динамическую ловушку для атомов и частиц субатомного масштаба. Взаимодействие (ограниченного) оптического поля с частицами домена может вызывать различные нелинейные оптические явления, включая генерацию гармоник.

Потенциальную часть виртуальной системы, описываемой уравнением (7), можно записать следующим образом в виде монохроматического поля:

$$V(y, t) = \frac{1}{2} L^3 \ddot{L} y^2 = F \cos \omega t y^2 \quad (8)$$

Таким образом, виртуальная система может рассматриваться как квантовый ящик, управляемый квадратично (нелинейно) поляризованным монохроматичным полем. Нас интересует изучение генерации оптических гармоник в системе, описываемой уравнениями (7) и (8). Здесь мы сфокусируемся на роли ограничения в оптической генерации гармоник. Основной физической характеристикой такого процесса является средний дипольный момент, который задается

$$\bar{d}(t) = - \langle \psi(x, t) | x | \psi(x, t) \rangle$$

Спектр генерации гармоник определяется выражением:

$$|d(\omega)|^2 = \left| \frac{1}{T} \int_0^T e^{-i\omega t} \bar{d}(t) dt \right|^2 \quad (9)$$

где T - общая продолжительность взаимодействия.

Рассмотрим водородоподобный (одноэлектронный) атом, ограниченный сферическим ящиком с непроницаемыми стенками с радиусом r_0 и управляемым внешним линейно поляризованным монохроматическим полем с силой F и частотой ω_0 , распространяющейся вдоль оси Z . Предполагая, что ядро атома зафиксировано в центре ящика, для динамики атомного электрона в такой системе имеем нестационарное уравнение Шредингера, которое задается как:

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + V) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (10)$$

где

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r}$$

и

$$V = -Fz \cos(\omega_0 t)$$

Для такого режима граничное условие для уравнения (10) накладываем в виде

$$\Psi(r_0, t) = 0$$

и начальное условие - основное состояние водородоподобного атомного электрона в сферическом ящике.

Для решения уравнения (10) необходимо разложение решения в терминах множества собственных функций невозмущенного сферического ящика как

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{nlm} C_{nlm}(t) u_{nlm}(\mathbf{r}, t) \quad (11)$$

где $u_{nlm}(\mathbf{r})$ - собственная функция квантовой частицы, ограниченная сферическим ящиком, который находится из стационарного уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] u_{nlm}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{nl} u_{nlm}(\mathbf{r}) \quad (12)$$

Здесь сферическая симметрия, поэтому решение уравнения (12) можно разделить на радиальную и угловую части: $u_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ - сферические гармоники. Радиальные собственные функции ящика можно записать в виде

$$R_{nl}(r) = N_{nl} j_l(\lambda_{nl} r) \quad (13)$$

где j_l - сферические функции Бесселя и $\lambda_{nl} = \sqrt{2\varepsilon_{nl}}$. Собственные значения ε_{nl} находятся из граничного условия, заданного на поверхности сферы. Это нули волновых функций сферического ящика на поверхности сферы, $R_{nl}(r)|_{r=r_0} = 0$.

Функция u_{nlm} выполняет условие ортонормированности

$$\int u_{n'l'm'}^* u_{nlm} d\mathbf{r} = \delta_{n'n} \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

Основной характеристикой генерации высших гармоник является средний дипольный момент, который можно использовать для вычисления интенсивности генерируемых гармоник. Это применимо также для генерации гармоник в системе «атом в ящике». Дипольный момент задан как

$$\bar{d}(t) = - \langle \Psi(\mathbf{r}, t) | z | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle$$

где волновая функция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ является решением уравнения (10). Спектр генерации гармоник рассчитывается по формуле (9).

В четвертой главе «**Квантовая динамика частиц в РТ-симметричных оптических ловушках**» рассмотрены одномерная и двухмерная модели периодически возмущенного квантового ящика.

В 1998 г. Бендер и Боттчер показали, что квантовые системы с неэрмитовым гамильтонианом могут обладать набором собственных состояний с действительными собственными значениями (действительным спектром). Иными словами, оказалось, что эрмитовость гамильтониана не является необходимым условием действительности его собственных значений и на основании таких гамильтонианов можно построить новую квантовую механику.

Исходным пунктом такого построения является следующий факт. В случае действительных собственных значений неэрмитова гамильтониана модуль волновой функции для собственных состояний системы является сохраняющейся во времени величиной даже в областях с комплексным потенциалом. На самом деле, для любого собственного состояния гамильтониана

$$\hat{H}\psi_k = E_k \psi_k. \quad (14)$$

Подставив (14) во временное уравнение Шредингера, получим

$$i \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = E_k \psi_k. \quad (15)$$

Очевидно, что при любом действительном E_k модуль ψ_k будет сохраняющейся во времени величиной. Однако собственные состояния такого гамильтониана не ортогональны, и для создания на основе таких гамильтонианов квантовой механики, сравнимой по самосогласованности с обыкновенной, требуется переопределить скалярное произведение и норму.

В оптике понятие РТ-симметрии можно ввести следующим образом. В двухмерном и одномерном случаях уравнения Максвелла сводятся к скалярному уравнению Гельмгольца

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \varepsilon(x, z) \right) E(x, z) = 0, \quad (16)$$

которое формально совпадает со стационарным уравнением Шредингера

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_k(x, z) - \frac{2m(V(x, z) - E_k)}{\hbar^2} \psi_k(x, z) = 0. \quad (17)$$

если сделать формальную замену $V(x, z) - E_k \rightarrow (\omega/c)^2 \varepsilon(x, z)$, $\psi_k(x, z) \rightarrow E(x, z)$ и $-\hbar^2/(2m) \rightarrow 1$. Так как в квантовой механике условие РТ-симметричности для системы, описываемой уравнением (17), сводится к требованию, налагаемому на потенциальную энергию, $V(x, z) = V^*(-x, -z)$, то по аналогии между потенциальной энергией в квантовой механике и диэлектрической проницаемостью в оптике условие РТ-симметричности оптической системы определяют как условие, налагаемое на диэлектрическую проницаемость среды:

$$\operatorname{Re} \varepsilon(\omega, x, z) = \operatorname{Re} \varepsilon(\omega, -x, -z), \quad (18a)$$

$$\operatorname{Im} \varepsilon(\omega, x, z) = -\operatorname{Im} \varepsilon(\omega, -x, -z). \quad (18b)$$

Отметим, что в стационарное уравнение Шредингера не входит зависимость от времени, поэтому операция обращения времени \hat{T} эквивалентна операции комплексного сопряжения \hat{K} . В дальнейшем под T -симметричностью системы в оптике мы будем понимать её K -симметричность, продолжая называть системы, удовлетворяющие условию (18), РТ-симметричными.

РТ-симметричный аналог системы может быть построен путем добавления в потенциал толчка мнимой части. Тогда РТ-симметричный потенциал биения можно записать в виде

$$U_{PT}(x,t) = V(x) \sum_l \delta(t - lT), \quad (16)$$

где $V(x) = \varepsilon \cos(2\pi x / \mu) + i\gamma \sin(2\pi x / \mu)$, ε - сила толчка и T - период силы толчка, $\gamma \geq 0$ - неэрмитовый параметр, который измеряет силу мнимой части толчка. Динамика системы определяется следующим нестационарным уравнением Шредингера:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = H_{PT} \Psi(x,t), \quad (17)$$

где H_{PT} - оператор Шредингера, содержащий потенциальный U_{PT} .

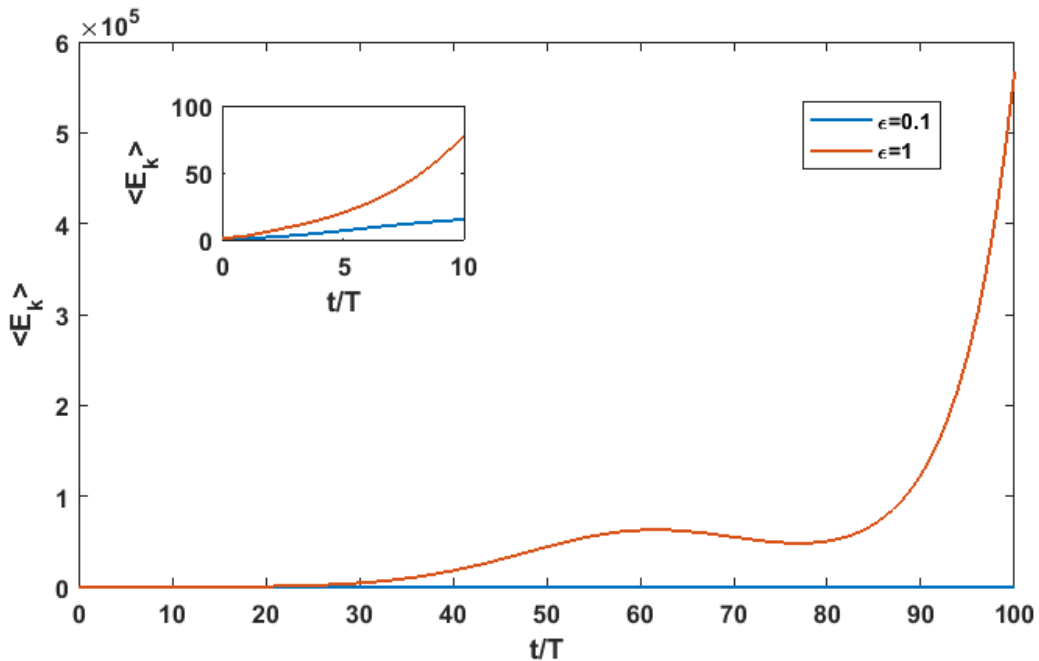


Рисунок 2. Средняя кинетическая энергия как функция от числа биений для разных сил биений при $\gamma = 2,72$ эВ, $L = 0,16$ нм, $T = 0,24$ ас и $\mu = 0,06$ нм (величины на осях представлены в атомных единицах).

Волновая функция $\Psi(x,t)$ удовлетворяет граничным условиям ящика, задаваемых как

$$\Psi(0,t) = \Psi(L,t). \quad (18)$$

На рисунке 2 средняя кинетическая энергия изображена как функция, зависящая от времени. Хотя профиль графика почти аналогичен профилю эрмитовой противоположности, значения $\langle E(t)_{kin} \rangle$ намного выше, чем в эрмитовом случае. Аналогично эрмитову случаю можно вычислить квазиэнергетические уровни для РТ-симметричной системы как собственные значения оператора U_{PT} . На рисунке 3 представлены средняя полная энергия (а) и квазиэнергия (б) как функция от параметра γ . Важной особенностью РТ-симметричных систем с независимыми от времени комплексными

потенциалами является тот факт, что ожидаемое значение гамильтонова оператора (энергетические уровни) всегда является действительным. Однако для зависящих от времени РТ-симметричных потенциалов ситуация совершенно иная. Средняя квазиэнергия становится комплексной, начиная с некоторых (критических) значений неэрмитова параметра γ . Этот эффект был назван нарушением РТ-симметрии. Здесь мы проверили такие эффекты для нашей системы и обнаружили, что мнимые части средней полной энергии и средней квазиэнергии становятся ненулевыми, начиная с некоторых значений γ . На рисунке 3 (а), где полная энергия (усредненная по координате и времени) представлена как функция от γ , можно наблюдать нарушение РТ-симметрии около $\gamma = 0,19$. Аналогичный эффект можно увидеть на рисунке 3 (б), где средняя квазиэнергия изображена как функция от γ . Критическое значение, при котором происходит нарушение РТ-симметрии, намного меньше, чем значение для РТ-симметричных роторов с биением. Это может быть результатом ограничения в нашей системе.

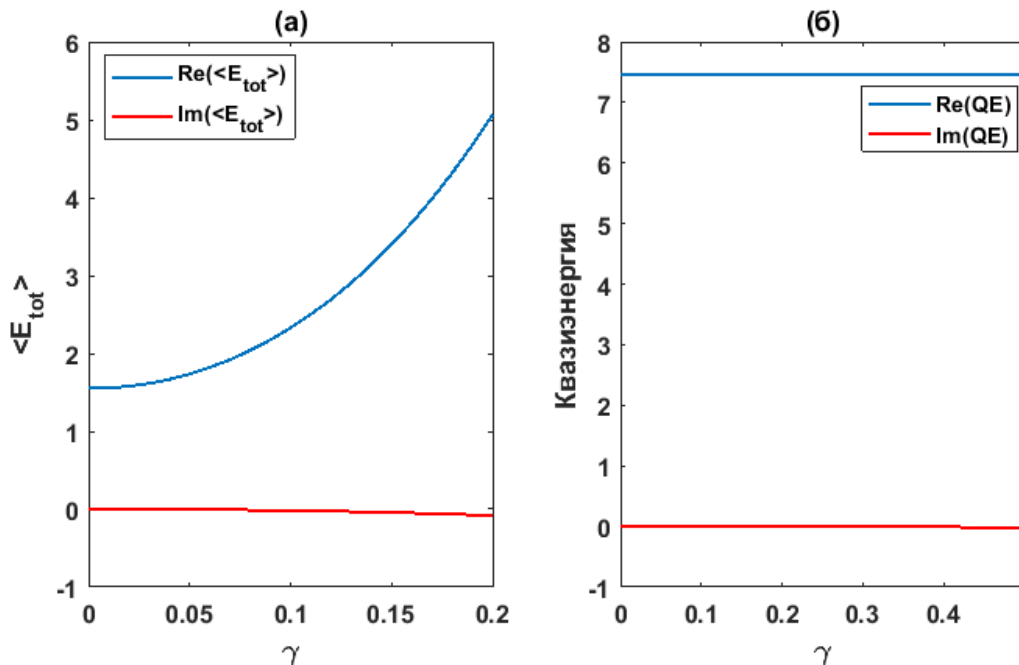


Рисунок 3: Средняя полная энергия (а) и квазиэнергия (б) как функция от γ для $\varepsilon = 2,72$ эВ, $T = 0,24$ ас, $\mu = 0,06$ нм, $L = 0,16$ нм (а) и $\varepsilon = 2,72$ эВ, $T = 0,24$ ас, $k = 2 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}$, $L = 0,5$ нм (б) (величины на осях представлены в атомных единицах).

В двумерной модели расчеты выполняются в той же последовательности, что и в одномерной модели. Динамика частиц в таком биллиарде описывается следующим нестационарным уравнением Шредингера:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, t) = [H_0 + V(x, y, t)] \Psi(x, y, t) \quad (19)$$

где $H_0 = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$ - Гамильтониан и

$V(x, y, t) = \varepsilon(\cos x + \cos y) \sum_{l=0}^{\infty} \delta(t - lT)$ - двумерный дельта-потенциал с толчками.

Волновая функция системы, то есть решение уравнения (19), может быть разложено в терминах невозмущенных билиардных волновых функций, задаваемых в виде:

$$\Psi(x, y, t) = \sum_{nm} A_{nm}(t) \psi_{nm}(x, y) \quad (20)$$

где $\psi_{nm}(x, y) = \frac{2}{a} \sin \frac{n\pi x}{a} \sin \frac{m\pi y}{a}$ (a - сторона квадрата).

Уравнение (20) позволит нам найти коэффициенты расширения в явном виде:

$$A_{nm}(t+T) = \sum_{n'm'} A_{n'm'}(t) V_{nmn'm'} e^{-iE_{n'm'}T}$$

где

$$V_{nmn'm'} = \iint \psi_{nm}^*(x, y) e^{-i\varepsilon(\cos x + \cos y)} \psi_{n'm'}(x, y) dx dy$$

и

$$E_{nm} = \frac{\pi^2}{a^2} (n^2 + m^2)$$

Одной из важных характеристик динамики в управляемых системах является средняя кинетическая энергия управляемой частицы. Для нашей системы ее можно определить как:

$$\langle E_k(t) \rangle = \iint \Psi^*(x, y, t) H_0 \Psi(x, y, t) = \sum_{nm} E_{nm} |A_{nm}(t)|^2$$

Вычисляя данную величину, можно исследовать ряд практически важных явлений в данной модели, таких как ускорение Ферми, нагрев или охлаждение газа из невзаимодействующих частиц, и т.д. Предложенная модель представляет интерес с точки зрения управляемого транспорта и контроля динамики двумерного электронного газа и других двумерных систем под конфайнментом.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Показано, что средняя кинетическая энергия частицы в двумерном квадратном бильярде, взаимодействующей с внешним периодическим полем, является периодической по времени, и при высоких значениях периода толчка

амплитуда и период средней кинетической энергии становятся большими (чем для малых периодов внешнего поля);

2. Впервые доказана возможность манипулирования квантовой динамикой атомного электрона в атоме, заключенного в сферическую квантовую ловушку с осциллирующими стенками путем выбора подходящих значений параметров осцилляции;

3. Впервые выявлена возможность диффузионного возбуждения и ионизации атома в ловушке с гармонически осциллирующими стенками;

4. Показано, что при быстром сокращении радиуса сферической ловушки наблюдается создание сверхвысокого давления на атом и становления энергетических уровней атома положительными;

5. В оптической реализации квантового ящика с нестационарными границами возможна генерация высоких оптических гармоник в квантовом режиме;

6. Показано, что интенсивность высших гармоник, генерируемых в системе «атом+квантовая сферическая ловушка» под воздействием оптического поля, ниже, чем в свободном атоме;

7. Впервые, на примере модели РТ-симметричной квантовой системы с конфайнментом, показана возможность нарушения РТ-симметрии в данной системе при определенных значениях параметра неэрмитовости.

**ONE-TIME SCIENTIFIC COUNCIL
AT SCIENTIFIC COUNCIL DSc.03/30.12.2019. FM.01.09
ON AWARD OF THE SCIENTIFIC DEGREES
AT NATIONAL UNIVERSITY OF UZBESITAN**

NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN

RAKHMANOV SAPARBOY ZARIPOVICH

**MODELLING OF THE QUANTUM DYNAMICS AND
NONLINEAR OPTICAL PHENOMENA ON HYDROGEN ATOM
IN NON-STATIONARY TRAPS**

01.04.02 – Theoretical physics

01.04.05 – Optics

**ABSTRACT OF DISSERTATION OF THE DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD) ON
PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

TASHKENT – 2021

The theme of dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered at the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2020.4.PhD/FM200.

The dissertation has been prepared at the National University of Uzbekistan.

The abstract of the dissertation was posted in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) on the website of Scientific council at: <http://nuu.uz> and on website of the Information and educational portal "ZiyoNet" at: <http://www.ziynet.uz>.

Scientific consultant:

Matrasulov Davron Urunovich

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Eshchanov Bakhodir Xudayberganovich

Doctor of Physical and Mathematical Sciences

Official opponents:

Sapaev Usman Kalandarovich

Doctor of Physical and Mathematical Sciences

Bayzakov Bakhtiyor Bayzakovich

Candidate of Physical and Mathematical Sciences

Leading organization:

Samarkand State University

The defense of the dissertation will take be held on _____, 2021 at ___ p.m. at the meeting of One-Time Scientific council at Scientific Council No. DSc.03/30.12.2019.FM.01.09 at National University of Uzbekistan. (Address: University str. 4, Tashkent, 100174, Uzbekistan, Ph.: ((+99871) 227-12-24, факс: (+99871) 246-53-21, 246-02-24, e-mail: nauka@nuu.uz).

Dissertation is possible to review in Information Resource Centre at National University of Uzbekistan (is registered № ____) (Address: University str. 4, Tashkent, 100174, Uzbekistan, Ph.: (+99871) 227-02-24).

The abstract of the dissertation was distributed on «__» _____ 2021.

(Registry record No. _____ on «__» _____ 2021).



M.M. Musakhanov

Chairman of the Scientific Council on award of Scientific Degrees, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician.

B.A. Fayzullayev

Scientific Secretary of the Scientific Council on Award of Scientific Degrees, CSc in Physics and Mathematics, docent.

B.J. Akhmedov

Chairman of the scientific Seminar under the Scientific Council on award of Scientific Degrees, Doctor of Physical and Mathematical Sciences.

INTRODUCTION (abstract of PhD dissertation)

The aim of the research is to study the quantum properties of an atom in traps, both stationary and non-stationary, to reveal the modification of the wave function and the energy spectrum, to generate optical harmonics in an atom in a trap during its interaction with an external optical field; solving the non-stationary Schrödinger equation for the “atom+trap” system by numerical methods; calculation of the spectrum of higher harmonics generated in such a system in the quantum regime.

The object of the research is stationary and non-stationary traps, particles and atoms in them, linearly polarized external electromagnetic field.

The scientific novelties of research work consist of the following:

a solution is obtained for the non-stationary one-dimensional Schrödinger equation with time-dependent boundary conditions, which describes the dynamics of a one-dimensional hydrogen atom in a box with moving boundaries;

a solution is obtained for the non-stationary three-dimensional Schrödinger equation with time-dependent boundary conditions, which describes the quantum dynamics of an atom in a spherical trap with a time-varying radius;

the energy spectrum (for a stationary trap), the time dependence of the average kinetic and total energies of an electron of an atom in a spherical trap with moving walls for various modes of wall motion are calculated: linearly expanding, linearly contracting, and harmonically expanding spheres;

a solution is obtained for the non-stationary Schrödinger equation describing the quantum dynamics of an atom in a spherical trap interacting with an external electromagnetic field;

for an atom in a spherical trap interacting with an external optical field, the spectrum of generation of higher harmonics in the quantum regime of an atom inside the trap is calculated;

a model of a PT-symmetric quantum confinement system interacting with an external optical PT-symmetric potential is proposed.

Implementation of the research results. The proposed in the thesis method for solving the Schrödinger equation in the presence of delta shocks was used (implemented) to simulate the dynamics of quantum particles in PT-symmetric systems interacting with external fields periodic in time within the framework of a grant from the Ministry of Innovative Development of Uzbekistan entitled “Quantum transport in branched carbon nanostructures ”(BF2-022) (The Physical Society of Uzbekistan 09.21.2020 No. 3/02-11 reference). The application of the results of the study made it possible to solve the problem of quantum transport of quasiparticles in PT-symmetric network-like carbon nanostructures of low dimension, using the solution of the Schrödinger equation describing a particle interacting with a PT-symmetric potential;

A reference on the significance and practical application of the dissertation topic was received from Hadi Susanto, professor at the University of Essex (UK) and University of Khalifa (United Arab Emirates).

The results of studying the generation of higher harmonics in an atom confined in a nanoscale trap was used in a foreign journal (European Physical Journal D

Volume: 75 Issue: 6 Article Number: 166 Published: JUN 2021. Scopus, IF: 1.425) in modeling the generation of high harmonics, which made it possible to better explain the mechanisms of generation of high harmonics in quantum systems with confinement.

The results of studying the quantum dynamics of a parity-time-symmetric kicked particle in a one-dimensional box have been used in foreign journals (New Journal of Physics Volume: 22 Issue: 10 Article Number: 103011 Published: OCT 2020. IF: 3.729; arXiv: 2103.05314v2, 2021) to explain the connection between non-Hermiticity and quantum chaos and quantum localization. The application of scientific results made it possible to reveal the connection between PT symmetry and chaos, as well as to show the violation of PT symmetry, starting from certain values of the push force in the PT symmetric system.

The structure and volume of the dissertation. The dissertation was presented on 121 pages consisting of an introduction, four chapters, a conclusion and references.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (часть I; part I)

1. S. Rakhmanov, O. V. Karpova, F. S. Khashimova, B. Kh. Eshchanov. High harmonic generation by an atom confined in nanoscale cavity \\ *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2020, 11 (3), 307–313 (3. Scopus. IF=0.2).
2. J. Yusupov, S. Rakhmanov, D. Matrasulov and H. Susanto. Quantum dynamics of a parity-time-symmetric kicked particle in a 1D box \\ *Journal of Physics A*, 52, 2019, 055303 (3. Scopus. IF=1.996).
3. S. Rakhmanov, D. Matrasulov, V.I. Matveev. Quantum dynamics of a hydrogen-like atom in a time-dependent box: non-adiabatic regime \\ *European Physical Journal D*, 72, 2018, 177 (3. Scopus. IF=1.366).
4. S. Rakhmanov, O. Karpova, D.R. Rakhimboeva, F. Khashimova, D. Babajanov. Quantum dynamics of hydrogen-like atom in one-dimensional box with oscillating walls \\ *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2015, 6 (6), 767–772 (3. Scopus. IF=0.2).
5. S. Rakhmanov, D. Babajanov, O. Karpova, F. Khoshimova. Quantum dynamics in a kicked square billiards \\ *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2015, 6 (2), 216–223 (3. Scopus. IF=0.2).

II бўлим (часть II; part II)

6. S. Raxmanov, B. Eshchanov, D. Matrasulov, V. Matveev. Atomning vaqtga bog'liq qorqonlarda optik garmonik generatsiyasi \\ *Фан ва таълимни ривожлантиришда Ёшларнинг ўрни Республика миқёсидаги илмий ва илмий-техник конференция Материаллари*, Тошкент, 22 ноябрь, 2019г. стр. 120.
7. S. Rakhmanov, H. Abduvakhidov, O.V. Karpova, D.U. Matrasulov. Optical harmonic generation in dynamical quantum box \\ *Abstracts of the international scientific conference “Actual problems of applied mathematics and information technologies”*, Tashkent, November 14-15 2019, p. 14-15.
8. S. Rakhmanov, D. Matrasulov, V.I. Matveev. Quantum dynamics of a hydrogen-like atom in a time-dependent box: non-adiabatic regime \\ *EuroSciCon Joint Event on Laser Optics & Photonics and Atomic & Plasma Science*, Prague, Czech, July 16-17, 2018.
9. S. Rakhmanov, D. Matrasulov, V.I. Matveev. Quantum dynamics of atom confined time-dependent trap \\ *Abstracts of the Uzbek-Israel international scientific conference*, Tashkent, October 6-10, 2017. p. 75.
10. O. Karpova, H. Abduvohitov, S. Rakhmanov. Second harmonic generation in a time-dependent optical trap \\ *Abstracts of the Uzbek-Israel international scientific conference*, Tashkent, October 6-10, 2017. p. 94-96.
11. O. Karpova, D. Babajanov, S. Rakhmanov. Optical second harmonic generation in a cavity with moving boundary \\ *International conference on applied optics and photonics*, Hanover, Germany, May 20th, 2016. p. 178.

12. S. Rakhmanov, O. Karova, F. Khoshimova. Particle dynamics in kicked square billiard \\ “Физика фанининг ривожда истеъдодли ёшларнинг ўрни” илмий-амалий конференция, Ташкент, 24-25 апрель 2015 г. стр. 37-38.

13. S. Rakhmanov, O. Karova, F. Khoshimova. Quantum dynamics of hydrogen like atom confined in time-dependent circular billiard \\ “Физика фанининг ривожда истеъдодли ёшларнинг ўрни” илмий-амалий конференция, Ташкент, 24-25 апрель, 2015 г. стр. 48-49.

14. S. Rakhmanov, D. Babajanov, O. Karova. Quantum particle dynamics in periodically driven square billiard \\ Respublika ilmiy-amaliy konferensiya (RIAK – 7), Ташкент, 16 май, 2014 г. стр. 11-13.