Квантовые интерференционные явления в статическом и динамическом отклике симметричной системы

Шубин Н.М.^{1,2}, Горбачевич А.А.^{1,2}

¹ Физический институт им. Лебедева РАН, 119991, ГСП-1, Москва, Ленинский проспект, 53.

² Национальный исследовательский университет «МИЭТ», 124498, Москва, г. Зеленоград, пл. Шокина, 1

DOI 10.34077/Semicond2019-191

Воздействие переменного возмущения, особые точки (ОТ) в РТ-симметричных квантовых системах и деструктивная квантовая интерференция (ДКИ) представляют собой физические механизмы и концепции, которые широко используются в различных областях физики. В настоящей работе изучается система, в которой все они могут проявляться одновременно, создавая богатую физическую картину высокочастотного отклика симметричного квантового проводника на переменное возмущения потенциала контактов. Квантовый (молекулярный) проводник, состоящий из молекулы и электродов, является типичным примером открытой квантовой системы (ОКС). Теоретическое описание ОКС апеллирует к понятию неэрмитовых гамильтонианов [1], которые, в отличие от эрмитовых, могут обладать ОТ в пространстве параметров, где собственные значения и собственные векторы сливаются, а оператор становится недиагонализуемым.

В настоящей работе представлено общее описание высокочастотного линейного отклика симметричной квантовой системы на периодическое возбуждение в электродах, основанное на формализме Келдыша для неравновесных функций Грина в базисе сильной связи для учета геометрии (топологии) квантового проводника. Показано, что линейный отклик туннельного тока может быть записан в виде, который позволяет обобщить коэффициент прохождения (туннельную прозрачность) на случай конечной частоты возбуждающего потенциала. Ключевой особенностью служит то, что это обобщение может быть сделано полностью в терминах характеристических функций, соответствующих задаче статического рассеяния [2]. Таким образом, построена статическая аналогия высокочастотного отклика симметричного квантового проводника. В частности, показано, что действительная часть обобщенного коэффициента прохождения имеет вид среднего значения двух статических прозрачностей рассматриваемой системы, где либо симметричные, либо антисимметричные состояния сдвигаются на величину энергии фотона возмущающего поля. Связь динамических свойств со статической задачей рассеяния можно интерпретировать с использованием понятия квазиэнергии (моды Флоке). В режиме линейного отклика (однофотонное туннелирование) квазиэнергия одного состояния может стать вырожденной с энергией другого состояния, что соответствует статическому транспорту в системе с вырожденными состояниями [3].

Исходя из построенной аналогии, могут быть сформулированы достаточные условия слияния резонансов в ОТ и возникновения ДКИ в терминах молекулярных орбиталей (МО), которые будут справедливы как для статического, так и для динамического режимов. В частности, слияние резонансов имеет место только для МО противоположной четности. Однако, пара соседних собственных состояний одинаковой четности неизбежно приводит к ДКИ. Такие условия используют формализм собственных состояний системы и значит могут быть применены непосредственно в ходе, например, численного расчета молекулярного спектра.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках проекта № 18-32-00453.

[1] N. Moiseyev, *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2011.

[2] A. A. Gorbatsevich and N. M. Shubin, *Phys. Rev. B* **96**, 205441 (2017).

[3] A. A. Gorbatsevich, G. Ya. Krasnikov and N. M. Shubin, *Sci. Rep.* **8**, 15780 (2018).