

SIMULATED QUANTUM COMPUTATION OF NON-EQUILIBRIUM CHARGE TRANSPORT IN A CYCLIC MOLECULE

A. Syurakshin^{a,1}, *V. Saleev*^a, *V. Yushankhai*^b

^a Institute of Natural Sciences,
Korolev Samara National Research University, Samara, Russia

^b Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

The Lindblad master equation (LME) for the density operator is applied to examine electron transport through a molecular junction with a ring component having two pathways for an electron propagation. Here the concept of quantum interference is addressed to check whether this phenomenon may influence the electric current in a far-from-equilibrium regime. The existence of two modes of electric current flow with and without the occurrence of a circular current in the benzene ring is shown, depending on the value of coupling (hopping parameter J) between the molecule and electrodes. LME is solved with the use of the open-source program code LindbladMPO that simulates elements of quantum algorithm on a classical computer.

Квантовое излучение Линдблада для оператора плотности применяется для изучения транспорта электронов через молекулярное соединение, включающее в себя петлевую компоненту с двумя путями для электронной проводимости. Рассматривается концепция квантовой интерференции с целью проверки, может ли это явление влиять на электрический ток в режиме сильнонеравновесного состояния системы. Показано существование двух режимов протекания электрического тока — с возникновением и без возникновения кругового тока в бензольном кольце в зависимости от величины связи (параметра перескока J) между молекулой и электродами. Решения уравнения Линдблада находятся с использованием открытого для пользователей программного кода LindbladMPO, моделирующего элементы квантового алгоритма на классическом компьютере.

PACS: 73.63.-b; 85.65.+h; 31.10.+z

Received on February 1, 2024.

¹E-mail: Asyurakshin@gmail.com