УДК 537.9:004.94

Поведение электронного кубита в 2D слое MoS2

*Булах Святослав Сергеевич, аспирант,* *младший научный сотрудник1,*bulakh-svyatoslav@mail.ru

*Чибисов Андрей Николаевич, д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник1*

*Фёдоров Александр Семёнович, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник2*

*1Вычислительный центр ДВО РАН, г. Хабаровск*

*2Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН*

Аннотация: В данной работе проводилось исследование возможности применения монослоя дисульфида молибдена (MoS2) для квантовых вычислений при помощи теории функционала плотности (DFT) и метода псевдопотенциала. Создание в монослое электронного кубита при образовании вакансии серы.

Ключевые слова: дисульфид молибдена, вакансия, псевдопотенциал, теория функционала плотности, кубит.

Введение

Дисульфид молибдена – представляет собой неорганическое соединение, которое принадлежит к дихалькогенидам переходных металлов. Кристаллическая структура имеет гексогональную форму плоскости атомов серы, расположенных по обе стороны от плоскости атомов молибдена. Эти плоскости накладываются друг на друга с сильными ковалентными связями между атомами, но слабыми Ван-дер-Ваальсовыми связями, удерживающими слои вместе. Это позволяет механически их разделить для образования двумерных листов MoS2 [1]. Объемный материал представляет собой полупроводник с непрямой запрещенной зоной равной 1,2 эВ. При удалении межслойных взаимодействий и удержании электронов в одной плоскости приводит к образованию прямой запрещенной зоны, энергия которой равна 1,9 эВ [2]. Так же стоит обратить внимание на изменение свойств слоя дисульфида молибдена при образовании в нем дефектов.

Исследования проводились при помощи теории функционала плоскости (DFT) ¬ это метод квантовой механики, используемый для описания электронных систем, таких как атомы, молекулы и твердые тела. Главная идея DFT заключается в том, что вся информация о системе электронов содержится в их электронной плотности, которая представляет собой распределение вероятности обнаружить электрон в определенном объеме пространства [3-5].

Результаты расчёта и их анализ

Основной принцип электронных кубитов заключается в том, что спин электрона или его орбитальное состояние может находится в суперпозиции двух состояний, что соответствует состояниям 0 и 1 в традиционной логике. Благодаря состоянию квантовой запутанности появляется возможность связывать несколько кубитов между собой и использовать это применительно к вычислениям [6].

Энергию образования вакансии мы определяли, используя выражение разности полных энергий:

(1)

где EV – полная энергия структуры с вакансией серы, Est – энергия слоя с вакансией, ES – энергия, приходящаяся на 1 атом серы в объемной структуре S, n – количество образованных вакансий. В итоге мы получили значение для энергии образования вакансии серы равную 3,04 эВ. Данное значение хорошо согласуется с результатами работы [7].

*Таблица 1*

**Изменение зонной структуры MoS2**

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Параметр | Объемный | Монослой | С вакансией серы | 2e | 1e |
| Ширина запрещенной зона (эВ) | 0,83 | 1,79 | 1,16 | 1,14 | 0,009 |
| Уровень валентной зоны (эВ) | 7,97 | -1,47 | -1,68 | -1,67 | -2,47 |
| Уровень зоны проводимости (эВ) | 8,81 | 0,32 | -0,52 | -0,52 | -2,46 |
| Энергия Ферми (эВ) | 8,08 | -1,48 | -1,56 | -1,53 | -2,470 |

Далее мы провели анализ электронной структуры исследуемых структур. В таблице 1 приведены изменения параметров зонной структуры для объемного MoS2, бездефектного монослоя MoS2 и с образованной вакансией серы MoS2-x. Из таблицы 1 видно, что при переходе дисульфида молибдена из объемного состояния в 2D состояние происходит увеличение ширины запрещенной зоны с 0,83 эВ до 1,74 эВ из-за смещения уровней валентной зоны и зоны проводимости. Это происходит из-за наличия поверхности. Образование вакансии серы в монослое MoS2 приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны до 1,16 эВ.

Из-за потери 6е в системе при удалении атома серы происходит увеличение заряда на ближайших к месту вакансии атомах серы, так же заряд увеличивается на атомах молибдена вблизи места вакансии. При удалении 1е из системы с вакансией на атомах молибдена заряд уменьшается, на атомах серы так же происходит уменьшение заряда. При удалении второго свободного е заряд вблизи вакансии так же уменьшается. Перераспределение заряда отражается на поведении полного потенциала системы.

Выводы

В ходе выполнения работы были проведены расчеты с использованием теории функционала плотности и метода псевдопотенциала. Исследована возможность управления параметрами системы и создания электронного кубита на основе монослоя MoS2 при помощи образования вакансии серы. В итоге можно заключить, что система на основе монослоя дисульфида молибдена может использоваться для создания электронного кубита и в дальнейшем масштабного квантового вычислителя. Полученные результаты могут использоваться для проведения экспериментальных и теоретических исследований.

Список использованных источников

1. Spin-defect qubits in two-dimensional transition metal dichalcogenides operating at telecomwavelengths / Y. Lee [et al.] // Nature Communications. — 2022. — Vol. 13. — P. 7501.
2. Single-layer MoS2 transistors / A. Radisavljevic B.and Radenovic [et al.] // Nature Nanotechnology.— 2011. — No. 6. — P. 147–150.
3. [Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. — 1964. — Vol. 136. — B864–B871.
4. Parr R. G., Weitao Y. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. — Oxford UniversityPress, 1995.
5. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects //Phys. Rev. — 1965. — Vol. 140. — A1133–A1138.
6. Lieven M. K. Vandersypen, Mark A. Eriksson; Quantum computing with semiconductor spins. Physics Today 1 August 2019; 72 (8): 38–45.
7. First-principles study of coupled effect of ripplocations and S-vacancies in MoS2 / G. A. Tritsaris [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2019. — Vol. 126, no. 8. — P. 084303.

The behavior of an electronic qubit in a 2D layer of MoS2

S.S. Bulakh, A.N. Chibisov, A.S. Fedorov

Abstract: This work investigates the possibility of using a monolayer of molybdenum disulfide (MoS2) for quantum computing through density functional theory (DFT) and the pseudopotential method. The creation of an electronic qubit in the monolayer occurs upon the formation of a sulfur vacancy.

Keywords: molybdenum disulfide, vacancy, pseudopotential, density functional theory, qubit.