УДК 537.9, 004.94

**КВАНТОВЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬ НА ОСНОВЕ СТРУКТУРЫ MoS2**

**С.С. Булах1, А.Н. Чибисов1,2**

*1Тихоокеанский государственный университет (г. Хабаровск)*

*2Вычислительный центр ДВО РАН (г. Хабаровск)*

[*2018100518@pnu.edu.ru*](mailto:2018100518@pnu.edu.ru)

*В данной работе авторы рассмотрели возможность моделирование квантово-механической системы на основе структуры MoS2. Составили тестовые структуры MoS2 и плоскую структуру на основе MoS2. Рассчитали электронную плотность транслированной структуры. Полученные результаты в дальнейшем можно применить для развития наноэлектроники и производства квантовых транзисторов.*

**QUANTUM COMPUTER BASED ON THE MoS2 STRUCTURE**

**S.S. Bulakh1, A.N. Chibisov1,2**

*1Pacific National University (Khabarovsk)*

*2Computing Center, Far Eastern Branch, Russian Academy of Sciences (Khabarovsk)*

[*2018100518@pnu.edu.ru*](mailto:2018100518@pnu.edu.ru)

*In this paper, the authors considered the possibility of modeling a quantum mechanical system based on the MoS2 structure. Compiled test structures of MoS2 and a planar structure based on MoS2. The electron density of the translated structure was calculated. The results obtained can be further applied to the development of nanoelectronics and the production of quantum transistors.*

В настоящее время высокий интерес проявляют к исследованиям свойств двумерных материалов поскольку их можно использовать для создания квантовых вычислителей на основе кубитов [1].

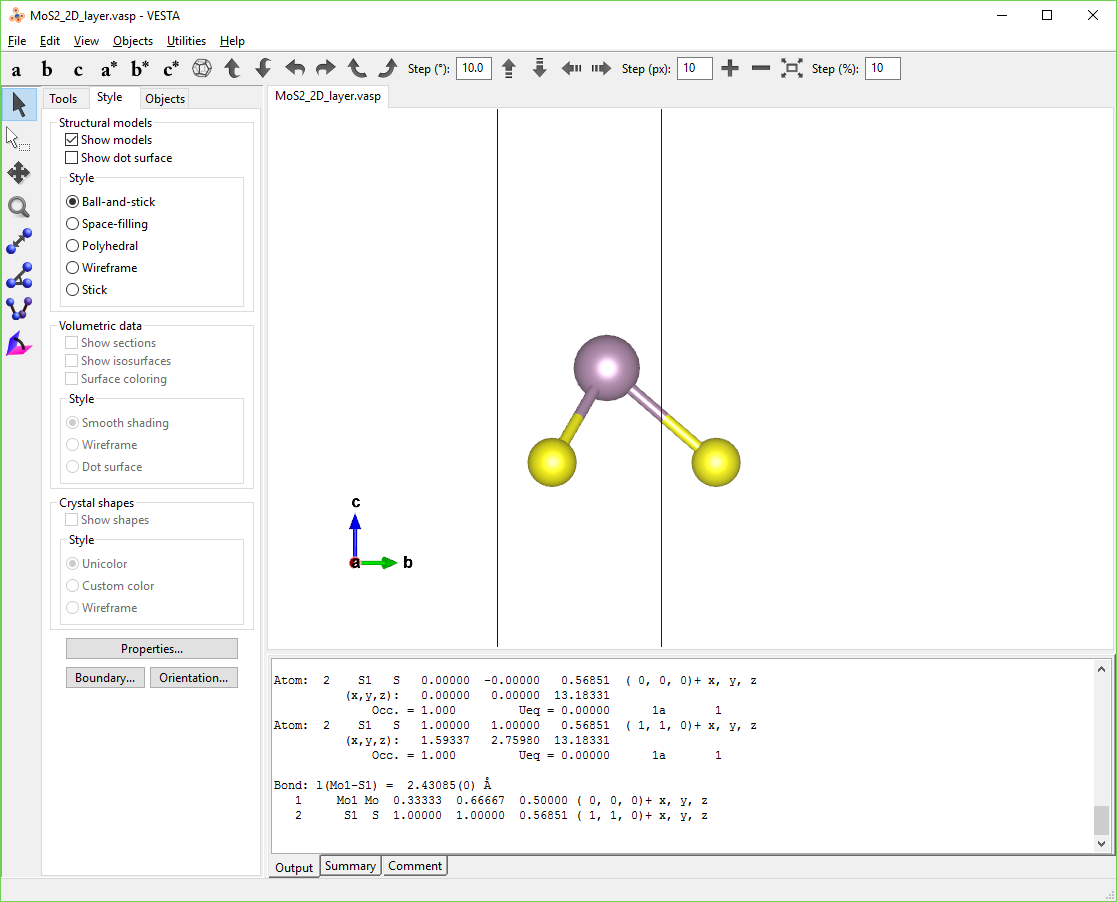
Сульфид молибдена можно использовать в качестве кубита благодаря его способности изменять свою электронную структуру при воздействии на него давления, что позволит контролировать его электронное состояние. Метод использования дефектов в структуре сульфида молибдена предполагает создавать в структуре вакансии серы или молибдена. Данный метод имеет преимущество в том, что дефекты могут быть локализованы в малом объеме, что позволяет создавать кубиты с высокой точностью. Однако требуется точно контролировать создание дефектов [2; 3].

В данной работе представлены результаты квантово-механических расчетов атомной и электронной структуры для 2D интерфейса на основе MoS2.

Расчеты проводились с использованием пакета программ Quantum Espresso, в основе которого лежит теория функционала плотности и метод псевдопотенциала [4; 5].

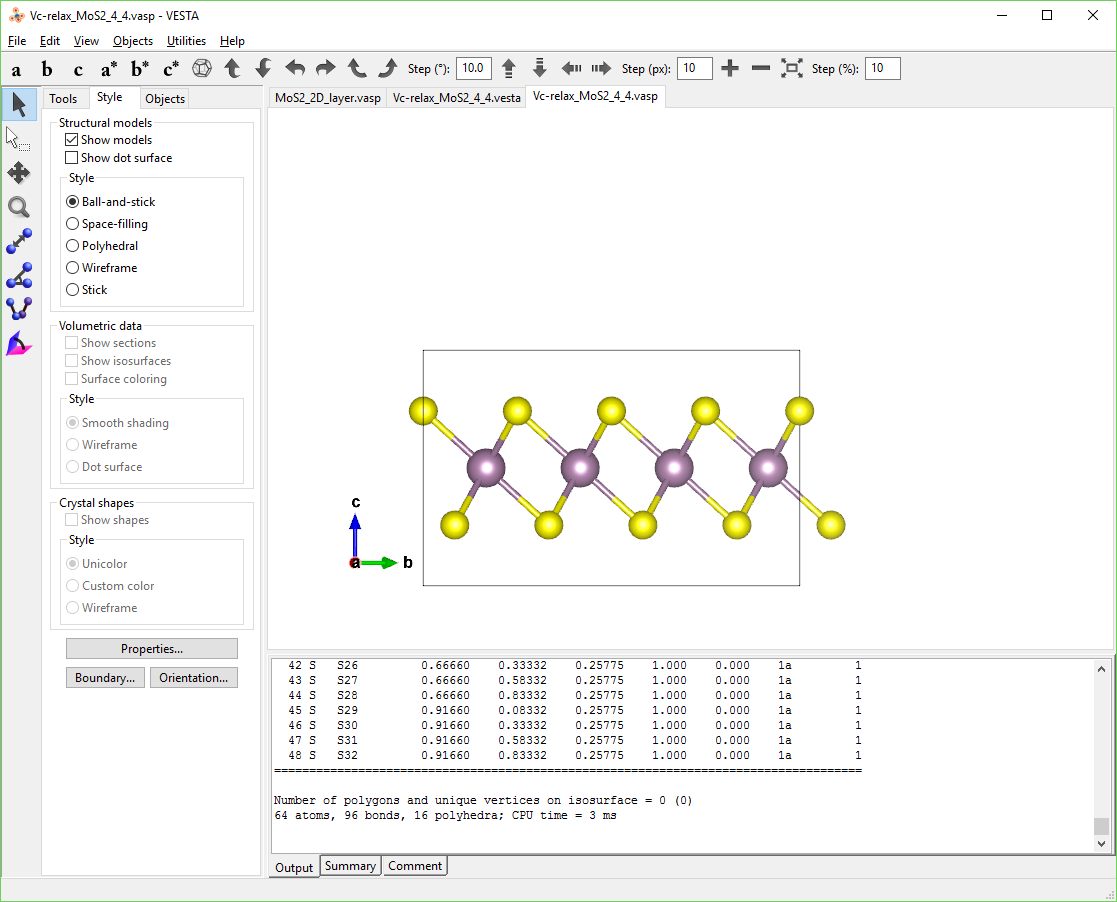
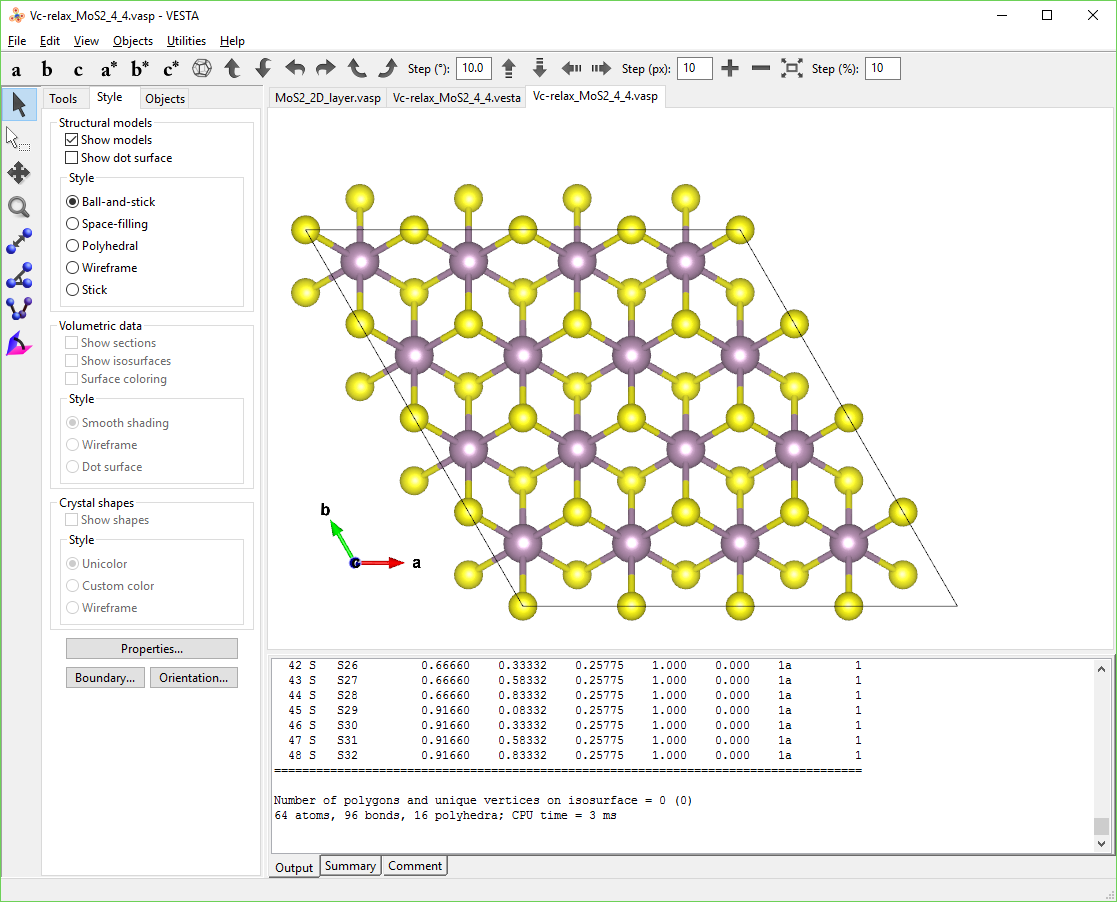
Тестовые расчеты для элементарной структуры проводились с однородной сеткой k-точек, построенной по схеме Монкхоста-Пэка. Расчеты проводились с использованием сетки k-точек 6×6×1. Так же в расчетах учитывалось спин-орбитальное неколлинеарное взаимодействие.

Для исследования 2D интерфейса атомной и электронной структуры использовали структуры на основе молекулы дисульфида молибдена. На рис. 1 представлена элементарная ячейка дисульфида молибдена, состоящая из двух атомов серы и одного атома молибдена.



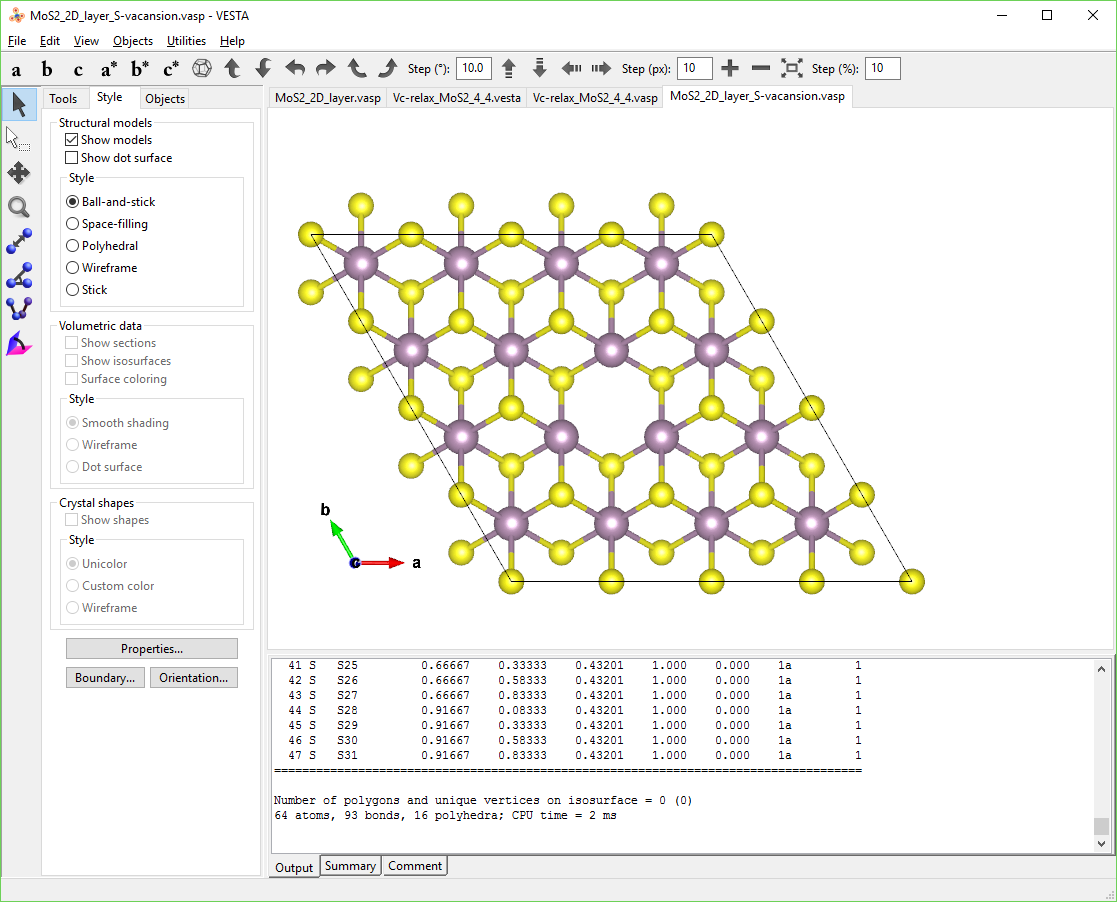
*Рис. 1*. Модель элементарной ячейки MoS2

Далее элементарная ячейка транслировалась по осям X и Y с увеличением параметров a и b в 4 раза. В результате получилась суперячейка из 48 атомов (16-молибден, 32-сера). На рис. 2 видно, что слой молибдена находится между слоями серы.



*Рис. 2*. Суперячейка MoS2

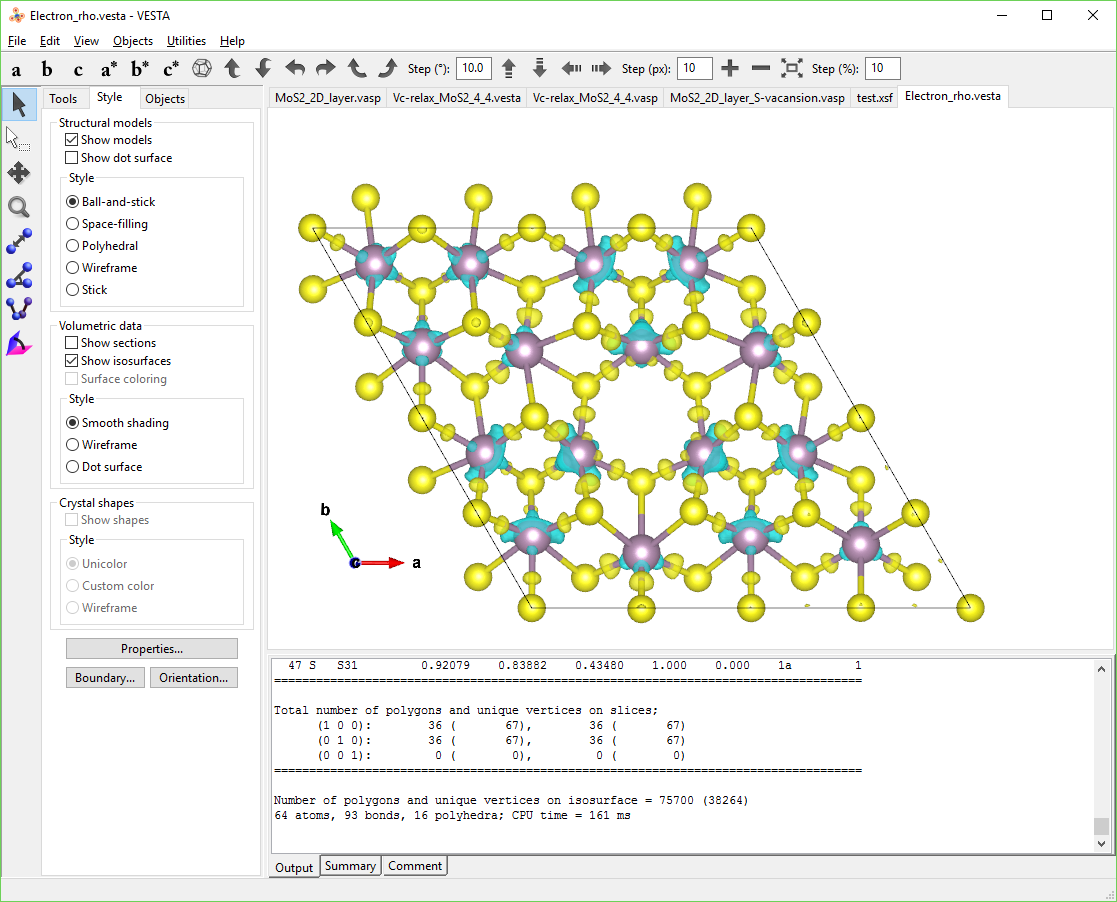
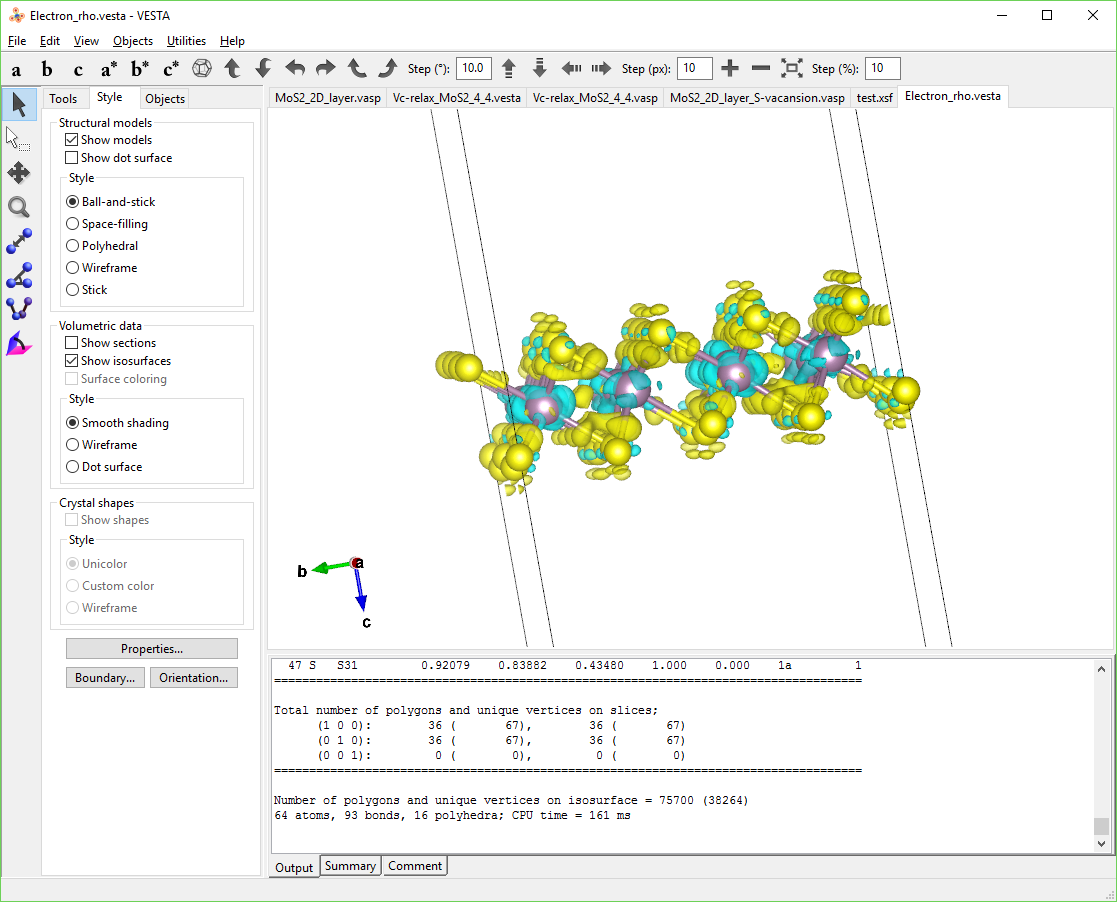
Затем из центра модели изъяли один атом серы, тем самым создав свободную вакансию внутри структуры. На рис. 3 представлен новый вид модели.



*Рис. 3*. Модель MoS2 с вакансией серы

Далее рассчитали распределение электронной плотности в системе с вакансией. На рис. 4 хорошо видна плотность распределения электронов по структуре.

В работе проведены квантово-механические расчеты атомной и электронной структуры 2D интерфейса на основе дисульфида молибдена. Для расчетов была использована теория функционала плотности с учетом неколлинеарной намагниченности в приближении спин-орбитального взаимодействия. В ходе работы был протестирован псевдопотенциал для исследуемых материалов, рассчитано распределение электронной плотности.



*Рис. 4*. Распределение электронной плотности

В дальнейшем планируется провести исследование с изменением намагниченности системы, найти полный потенциал системы.

**Л И Т Е Р А Т У Р А**

1. Awschalom, D. D., Hanson, R.,Wrachtrup, J. & Zhou, B. B. Quantum technologies with optically interfaced solid-state spins. Nat. Photonics 12, 516–527 (2018).
2. Ma, H., Sheng, N., Govoni, M. & Galli, G. First-principles studies of strongly correlated states in defect spin qubits in diamond. Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 25522–25527 (2020).
3. J. Pawłowski, D. ˙ Zebrowski, and S. Bednarek, Valley qubit in a gated MoS2 monolayer quantum dot, Phys. Rev. B 97, 155412 (2018).
4. Quantum ESPRESSO user manual. https://www.quantum-espresso.org/resources/users-manual
5. S. Baroni and P. Giannozzi. "Towards a unified description of electronic and phononic properties of solids." Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 29, no. 46, 2017.