

Моделирование динамики гетероатомов в алмазе с использованием машинно-обучаемых потенциалов

Зеленина А.И.^{1,2}, Орехов Н.Д.¹, Кудряшов С.И.²

zelenina.ai@phystech.edu

¹ МФТИ, Физтех, Долгопрудный, Россия

² Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

Алмаз обладает большим количеством разнообразных физических свойств, в том числе прикладных [1]. Свойства зависят от точечных дефектов, которые входят в состав каждого образца. Наиболее часто встречающиеся гетероатомы – азот и водород. Управляя трансформациями азотных дефектов с помощью лазерного облучения, в алмазе можно создать уникальные наномаркеры, которые актуальны для технологии промышленного трейсинга. Водород входит в состав любого как природного, так и искусственного образца. Основными механизмами преобразований одних центров в другие служат вакансии и междоузлия. Междоузлия быстро перемещаются в решетке, поэтому отследить, в каких именно реакциях они участвуют, экспериментально достаточно затруднительно.

На предыдущем этапе работы проведены расчеты, связанные с динамикой NV, NV₂, NV₃ и N₂V₃-центров. В них удалось показать новый механизм вакансионной диффузии атома азота [2], а именно, что азот активно диффундирует в присутствии 3 вакансий в соседних положениях, при этом вакансии диссоциируют и могут присоединяться к другим атомам азота. В данной работе изучается динамика точечных дефектов, содержащих вакансии и междоузлия, методом молекулярной динамики в пакете LAMMPS [3]. Установлены наиболее стабильные структуры азотных дефектов различного состава, которые потенциально могут участвовать как промежуточные образования в процессе агрегации азотных атомов. Вычислена энергия активации одиночных междоузлий и моновакансии, проведено качественное и количественное сравнение с имеющимися литературными данными и результатами расчетов из первых принципов. Работа проведена с использованием машинно-обучаемых потенциалов типа МТР и типа NEP, обучение которых производилось непосредственно в ходе расчетов [4, 5].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 25-73-20143.

Ссылки

1. M.N.R. Ashfold, J.P. Goss, B. L. Green, P. W. May, M. E. Newton, and C. V. Peaker, Chem. Rev. (2020), **120**, 5745.
2. A. Zelenina, N. Smirnov, P. Pakholchuk, N. Busleev, V. Vins, P. Danilov, A. Gorevoy, N. Orekhov, and S. Kudryashov, Diam. Relat. Mater. (2024), **148**, 111427.
3. Plimpton S. J. Comput. Phys. (1995), **117**, 1.
4. I. S. Novikov K. Gubaev, E. V. Podryabinkin, and A. V. Shapeev, Mach. Learn.: Sci. Technol. (2020), **2**, 025002.
5. Z. Fan, Z. Zeng, C. Zhang, Ya. Wang, K. Song, H. Dong, Yu. Chen, and T. Ala-Nissila, Phys. Rev. B. (2021), **104**, 104309.