**Атомистическое моделирование азотных дефектов в алмазе с использованием машинно-обучаемого потенциала**

***Зеленина А.И., Орехов Н.Д.***

*Аспирант, 2 год обучения*

*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),   
физтех-школа электроники, фотоники и молекулярной физики, Долгопрудный, Россия*

*E-mail:* [*zelenina.ai@phystech.edu*](mailto:zelenina.ai@phystech.edu)

Алмаз обладает большим количеством разнообразных физических свойств, в том числе прикладных [1]. Свойства зависят от точечных дефектов, которые входят в состав каждого образца. Управляя трансформациями азотных дефектов с помощью лазерного облучения, в алмазе можно создать уникальные наномаркеры, которые актуальны в технологии промышленного трейсинга. Основными механизмами преобразований одних центров в другие служат вакансии и азотные междоузлия. Междоузлия быстро перемещаются в решётке, поэтому отследить, в каких именно реакциях они участвуют, экспериментально достаточно затруднительно.

На предыдущем этапе работы проведены расчёты, 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 типа «азот-вакансия» и «азот-азот» в диапазоне температур 2200–3500 К методом молекулярной динамики в пакете LAMMPS [3]. В расчётах исследуется взаимодействие центров, содержащих как вакансии (от 1 до 4), так и междоузлия от (1 до 3). Установлены наиболее стабильные структуры азотных дефектов различного состава, которые потенциально могут участвовать как промежуточные образования в цепочке облагораживания алмаза (NV-H3-N3). Также проведены расчёты, которые показывают возможность образования N3-центра в результате диссоциации B-центра. Вычислена энергия активации одиночных междоузлий, проведено качественное и количественное сравнение с имеющимися литературными данными и результатами расчётов из первых принципов. Работа проведена с использованием машинно-обучаемого потенциала типа MTP, обучение которого производилось непосредственно в ходе расчётов [4].

**Литература**

1. Ashfold M.N.R. et al. Nitrogen in diamond // Chem. Rev. 2020. Vol. 120(12). P. 5745-5794.

2. Zelenina A. et al. // Diamond Relat. Mater. 2024. Vol. 148. P. 111427.

3. Plimpton S. Fast parellel algorithms for short-range molecular-dynamics // J. Comput. Phys. 1995. Vol. 117(1). P. 1-19.

4. Novikov I.S. et al. The MLIP-package: moment tensor potentials with MPI and active learning // Mach. Learn.: Sci. Technol. 2020. Vol. 2(2). P. 025002.