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

***Зеленина А.И.***

*Аспирант*

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

*Физический институт им. Лебедева, Москва, Россия*

*zelenina.ai@phystech.edu*

Дефекты кристаллической решётки алмаза оказывают значительное влияние на его физические свойства, что даёт возможность применять природные и синтетические алмазы в квантовых технологиях, использовать дефекты как маркеры в промышленном трейсинге, исследовать лазерную генерацию дефектов [1]. На данный момент существует большое количество информации о динамике атомов азота и динамике вакансий в отдельности, но их взаимное поведение и превращения одних центров в другие изучено недостаточно [2].

В данной работе рассматривается динамика точечных дефектов типа «азот-вакансия» в диапазоне температур 3000-3500 К методом молекулярной динамики в пакете LAMMPS [3]. Показано, что NV- и NV2-центры локализованы, в то время как NV3-центр активно диффундирует. Выполнено сравнение эволюции NV3-центра и H3-центра, окружённого 2 вакансиями. Получена температурная зависимость коэффициента диффузии NV3-центра в алмазе. Выполнены расчёты энергетических характеристик, проведено качественное сравнение с имеющимися литературными данными и результатами первопринципных расчётов. Работа проведена с использованием машинно-обучаемого потенциала типа MTP [4], обучение которого производилось непосредственно в ходе расчётов.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 23-23-00442.

**Литература**

1. Ashfold M. N. R. et al. Nitrogen in diamond // Chemical reviews. 2020, №120(12). p. 5745-5794.
2. Kudryashov S. I. et al. Intrapulse in situ Raman probing of electron, phonon and structural dynamics in synthetic diamond excited by ultrashort laser pulses: Insights into atomistic structural damage // Carbon. 2024, V. 217. p. 118606.
3. Plimpton, S. Fast parallel algorithms for short-range molecular-dynamics // Journal of computational physics. 1995, V. 117. №1. p. 1-19.
4. Novikov I. S. et al. The MLIP package: moment tensor potentials with MPI and active learning // Machine Learning: Science and Technology. 2020, №2(2). p. 025002.