**Моделирование формирования алмаза в многослойном графене в результате индентирования с помощью потенциала машинного обучения**

***Ращупкин A.A., Ерохин С.В., Сорокин П.Б.***

*Студент, 3 курс бакалавриата*

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, Россия*

*E-mail: a.rashchupkin@misis.ru*

Изучение механизма прямого преобразования графита в алмаз является предметом исследований на протяжении длительного промежутка времени [1-3], однако остаются открытыми для дискуссий вопросы относительно промежуточных стадий превращения фаз и путей их трансформации.

Компьютерное моделирование данных процессов затруднено из-за неспособности эмпирических потенциалов точно описать энергетику превращения [2-3], в то время как вычислительные затраты не позволяют использовать более надежные методы теории функционала плотности (ТФП). С другой стороны, машинное обучение позволяет создавать потенциалы, которые описывают взаимодействия с точностью методов ТФП, а время расчётов масштабируется линейно с числом атомов, позволяя моделировать 104-106 атомов в структурах.

В данной работе было изучено возникновение алмазных зародышей при вдавливании сферического индентора в плёнку многослойного графена, ограниченного непроницаемой подложкой снизу. Для этого были натренированы с помощью машинного обучения потенциалы тензора момента (MTP) [4-5]. С помощью ТФП был подготовлен набор углеродных структур, включающий плёнки многослойного графена с разным числом слоёв и упаковкой, а также плёнки кубического и гексагонального алмаза с различной ориентацией и под давлением. Далее в работе проведено моделирование индентирования графеновых плёнок с числом слоёв от 2 до 15. Было показано формирование кубического алмаза и получены значения давления фазового перехода в зависимости от числа слоёв. Результаты сравнивались со случаем трансформации в гексагональный алмаз (лонсдейлит). Также расчёты верифицировались с помощью ТФП метода для случая фазового перехода графеновых плёнок в алмаз. Полученные результаты могут иметь важное практическое значение для разработки новых методов синтеза алмазных наноматериалов с контролируемыми структурными и физико-химическими характеристиками.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в соответствии с научно-исследовательским проектом № 22-72-00138. Расчеты проводились на суперкомпьютерном кластере, предоставленном лабораторией “Моделирования и разработки новых материалов” НИТУ "МИСИС", и межведомственном суперкомпьютерном центре Российской академии наук.*

**Литература**

1. Khaliullin R.Z. et al. Graphite-diamond phase coexistence study employing a neural-network mapping of the ab initio potential energy surface // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81, № 10. P. 100103.

2. Khaliullin R.Z. et al. Nucleation mechanism for the direct graphite-to-diamond phase transition // Nat. Mater. 2011. Vol. 10, № 9. P. 693–697. DOI: 10.1038/s41565-017-0023-9

3. Gao, Y., Cao, T., Cellini, F. et al. Ultrahard carbon film from epitaxial two-layer graphene. Nature Nanotech 13, 133–138 (2018). DOI:10.1038/s41565-017-0023-9

4. Novikov I.S. et al. The MLIP package: moment tensor potentials with MPI and active learning // Mach. Learn.: Sci. Technol. 2021. Vol. 2, № 2. P. 025002. DOI: 10.1088/2632-2153/abc9fe

5. Ерохин С.В., Буйлова М.А., Сорокин П.Б., Тренировка потенциалов машинного обучения для моделирования зародышеобразования в графите, ЖСХ, т.65, №4, 2024, 125695, DOI: 10.26902/JSC\_id125695