РАСЧЕТЫ ИМПЛАНТАЦИИ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ В ОКСИД ГАЛЛЛИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПОТЕНЦИАЛОВ , ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

А.В. Степанов1,2,\*), А.С. Сабиров3), Д.И. Тетельбуам2)

1) Чувашский ГАУ, Чебоксары, Россия

2) ННГУ им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

3) ЧГУ, Чебоксары, Россия

\*) e-mail: for.antonstep@gmail.com

В работе методом машинного обучения создается потенциал взаимодействия под системы Ga2O3 с примесями для классической молекулярной динамики. Для создания потенциала используется код QUIP [1] и код VASP [2] для квантово-химических расчетов методом DFT. С помощью созданного потенциала с применением кода LAMMPS проводятся расчеты ионной имплантации Si в beta-Ga2O3.

В результате расчетов показаны наиболее вероятные распределения примесных атомов в кристалле beta-Ga2O3.

ЛИТЕРАТУРА

1. James R Kermode // J. Phys.: Condens. Matter, 2020, 32, 30590.

2. ДG. Kresse and J. Hafner // Phys. Rev. B, 1993, 47 , 558.

3. S. Plimpton // J Comp Phys, 1995, 117, 1.