



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):
2021664355

Дата регистрации: 06.09.2021

Номер и дата поступления заявки:
2021663543 30.08.2021

Дата публикации и номер бюллетеня:
06.09.2021 Бюл. № 9

Контактные реквизиты:
89135951646, meg@iph.krasn.ru

Автор(ы):

Тарасов Иван Анатольевич (RU),
Высотин Максим Александрович (RU),
Варнаков Сергей Николаевич (RU)

Правообладатель(и):

Федеральное государственное бюджетное
научное учреждение "Федеральный
исследовательский центр "Красноярский
научный центр Сибирского отделения
Российской академии наук" (RU)

Название программы для ЭВМ:
"МАТЧНА.alpha"

Реферат:

Программа осуществляет прогнозирование гетероэпитаксиальных атомарно-гладких и ступенчатых интерфейсов между фазами с различной симметрией кристаллической решетки и химическим составом, а также их атомного упорядочения с применением кристаллогеометрических принципов. Программа обладает возможностью вывода результатов расчетов для комбинирования с доступными пакетами программ для физического моделирования и квантово-химических вычислений. Программа позволяет решать задачу 10-мерной оптимизации гетероинтерфейса. В программе возможно исследование интерфейсов с большей толщиной и площадью (100x100 нм) для анализа возможных ступенчатых эпитаксиальных интерфейсов. Оценка энергии границы раздела выполняется в рамках кристаллогеометрических методов, таких как подсчет количества совпадений и узлов в сопряженных решетках, имитирующих атомные дефекты на границе раздела. Тип ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК. ОС: Linux, Windows.

Язык программирования: C++, MATLAB

Объем программы для ЭВМ: 4 МБ