



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