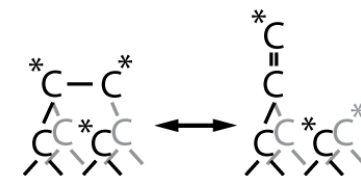
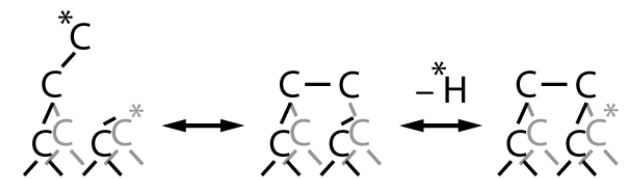
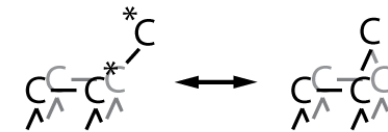
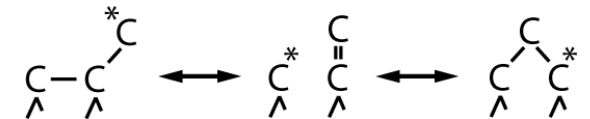
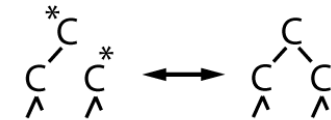
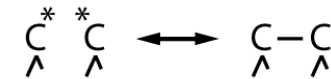
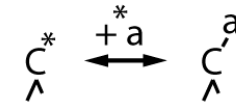
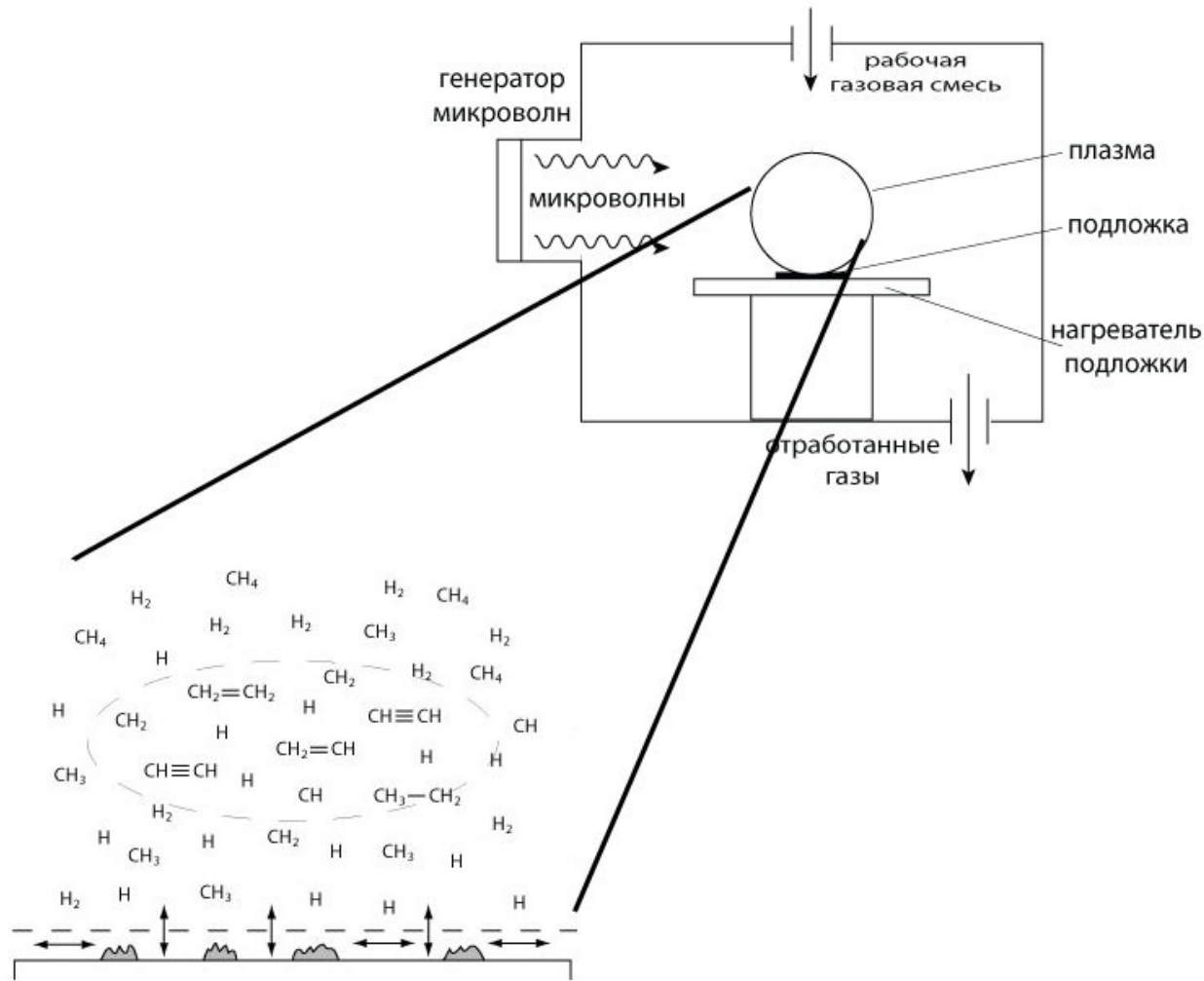


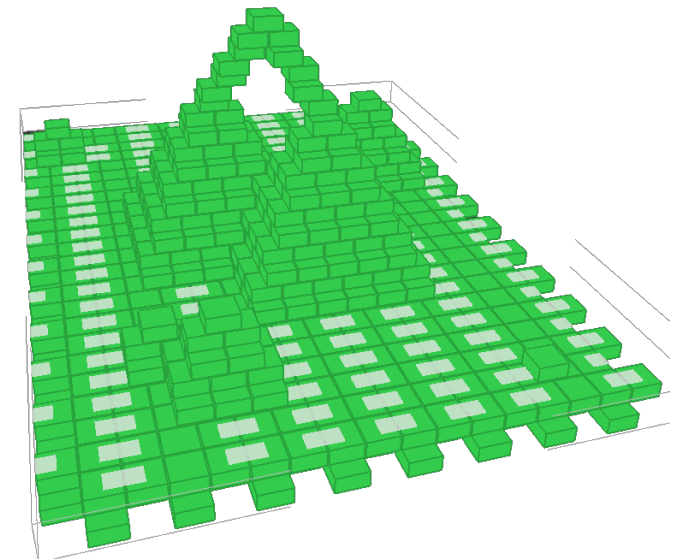
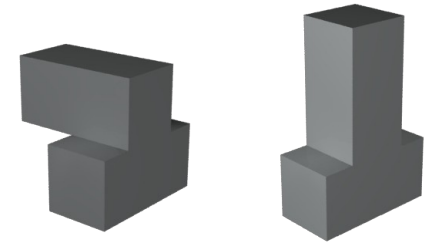
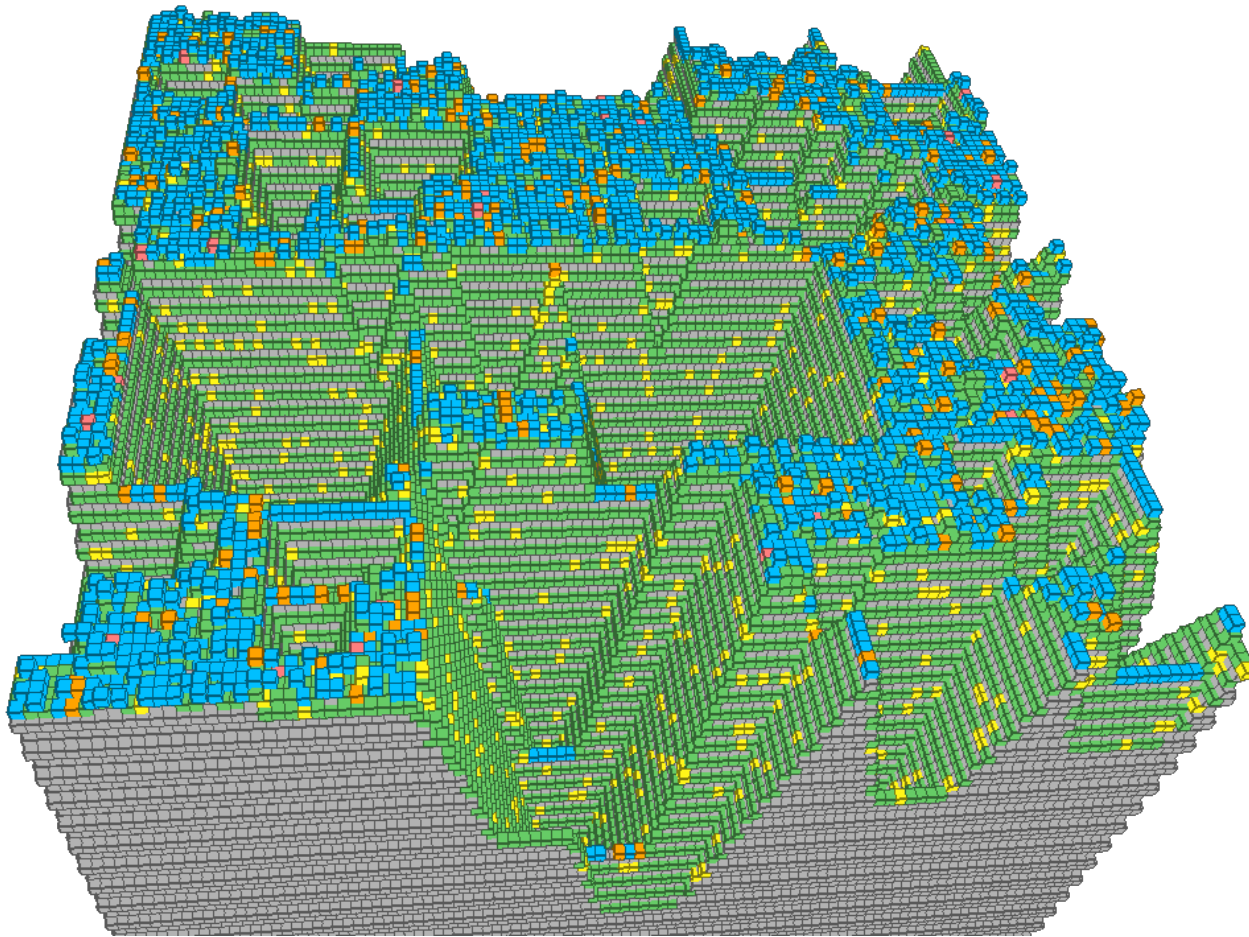
Моделирование фазового перехода газ-твёрдое на атомарном уровне, на примере роста алмазной плёнки

Аспирант: Глеб Аверчук
Руководители:
д.т.н. проф. Э.М. Кольцова
д.т.н. проф. Е.С. Куркина

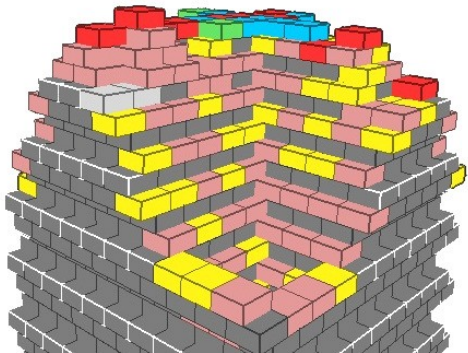
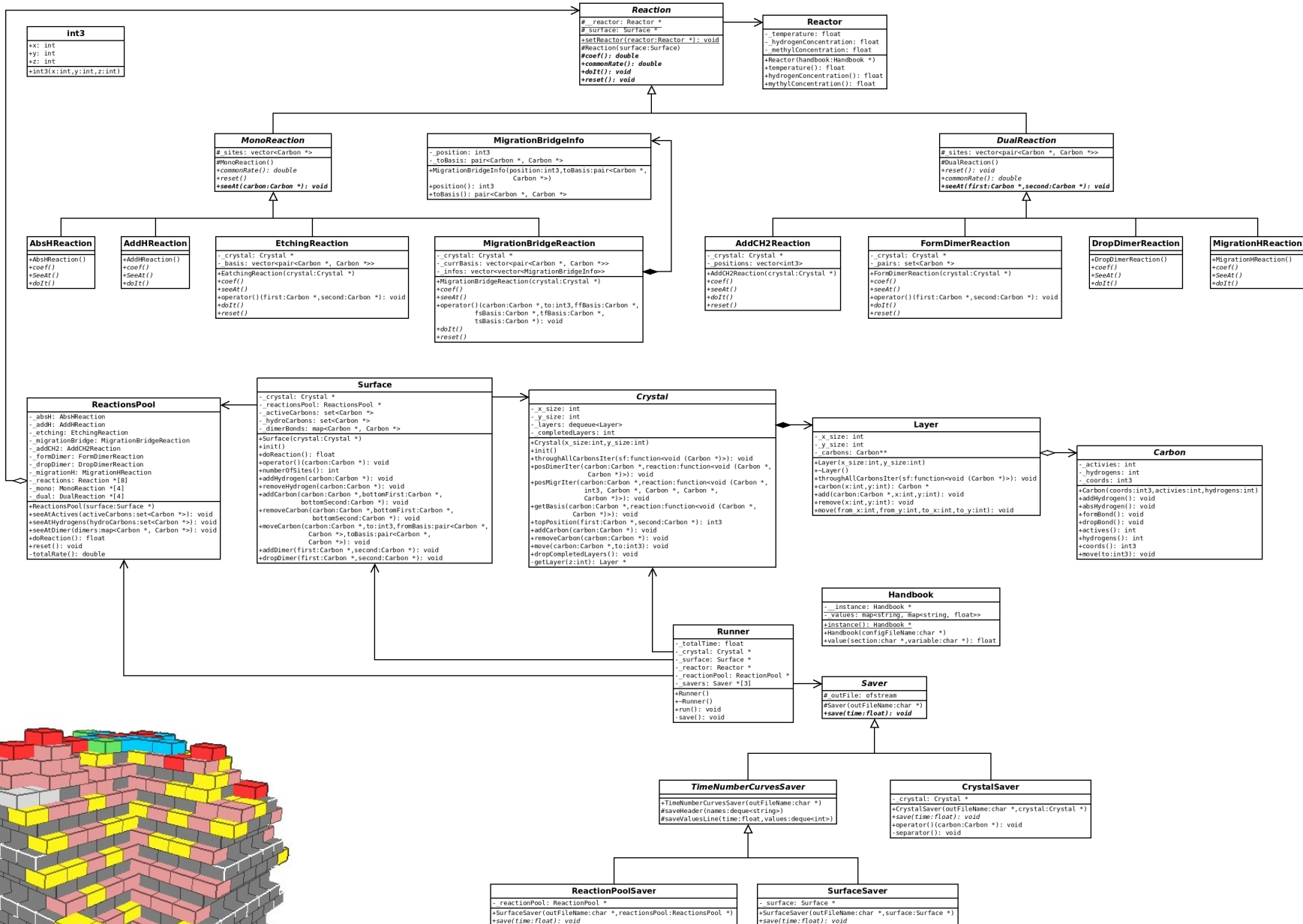
Описание процесса



Клеточный автомат

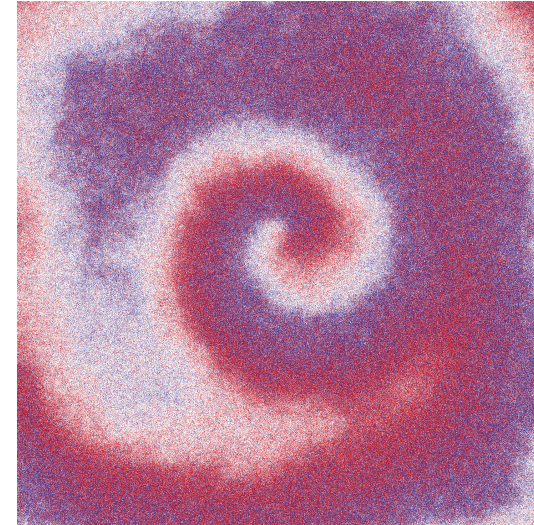
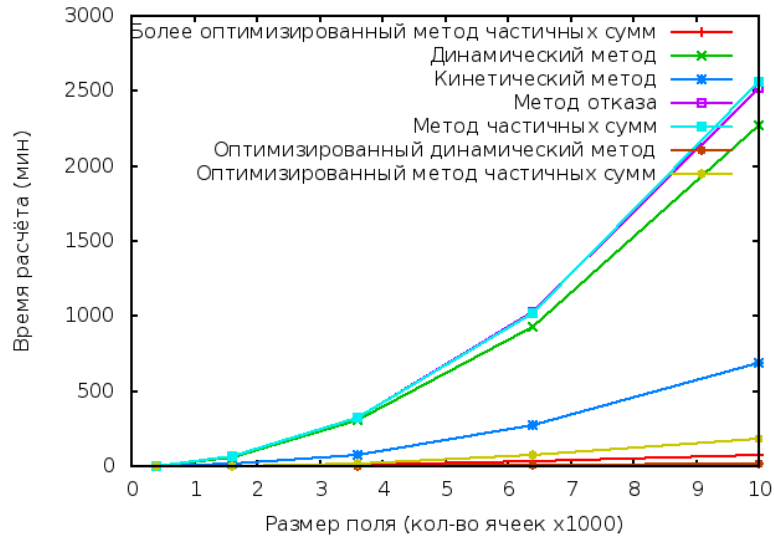


Упрощённая модель МК

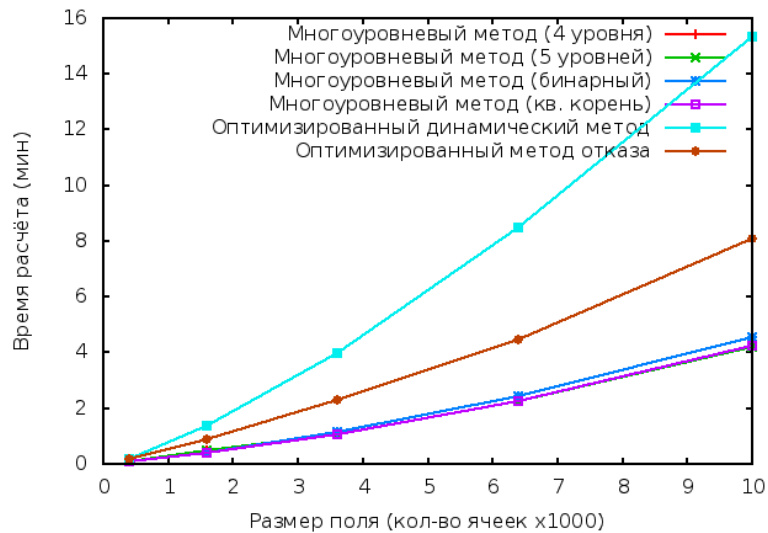


Выбор метода МК

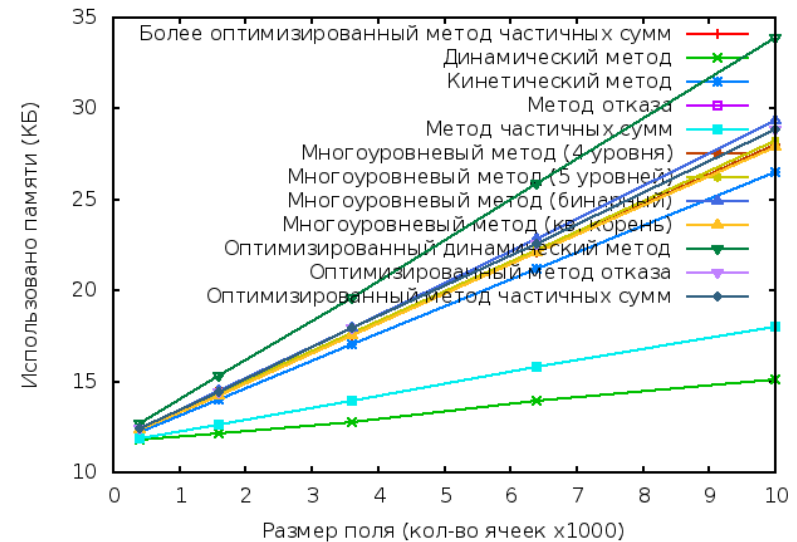
Сравнение времён расчёта



Сравнение времён расчёта



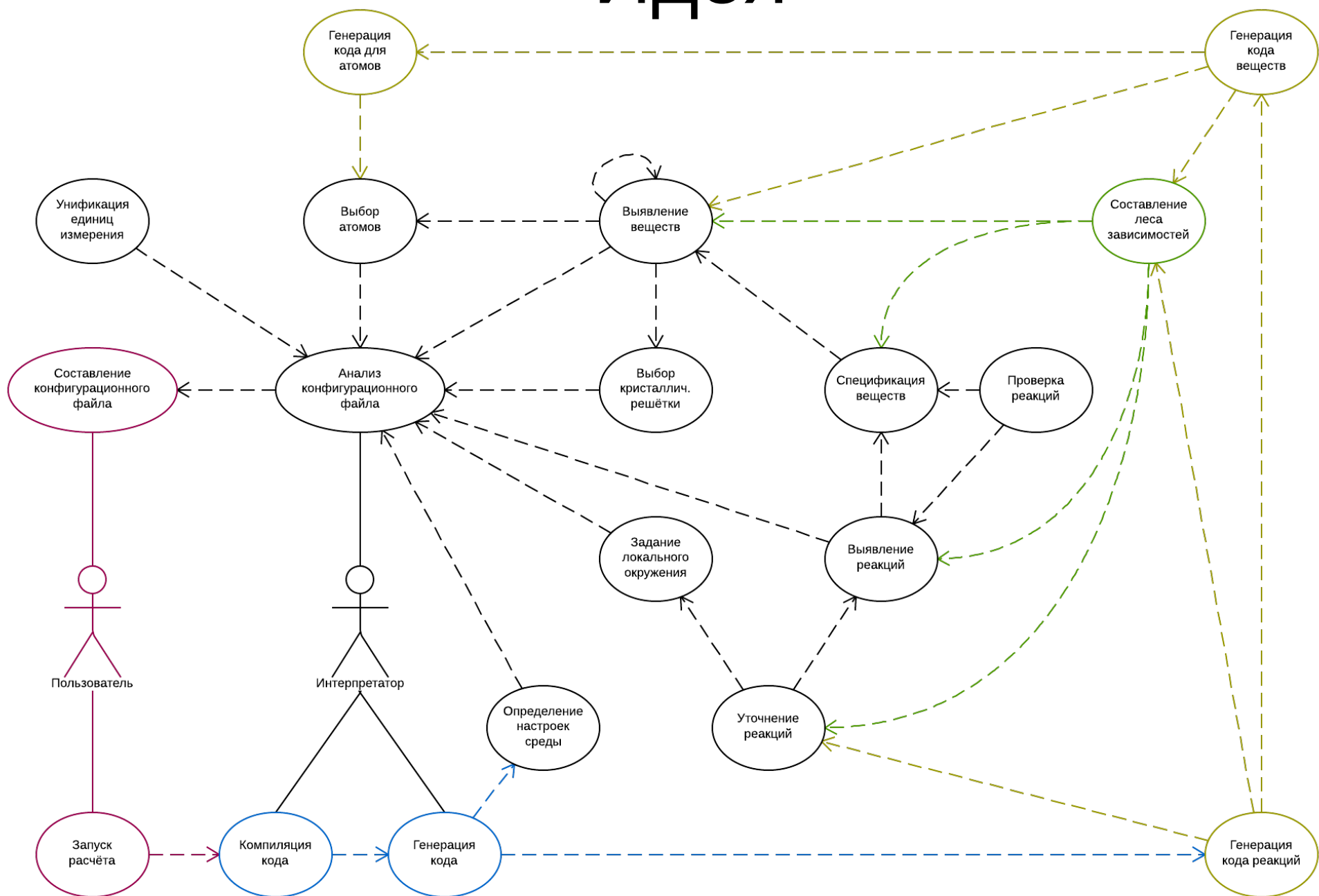
Сравнение потребления памяти



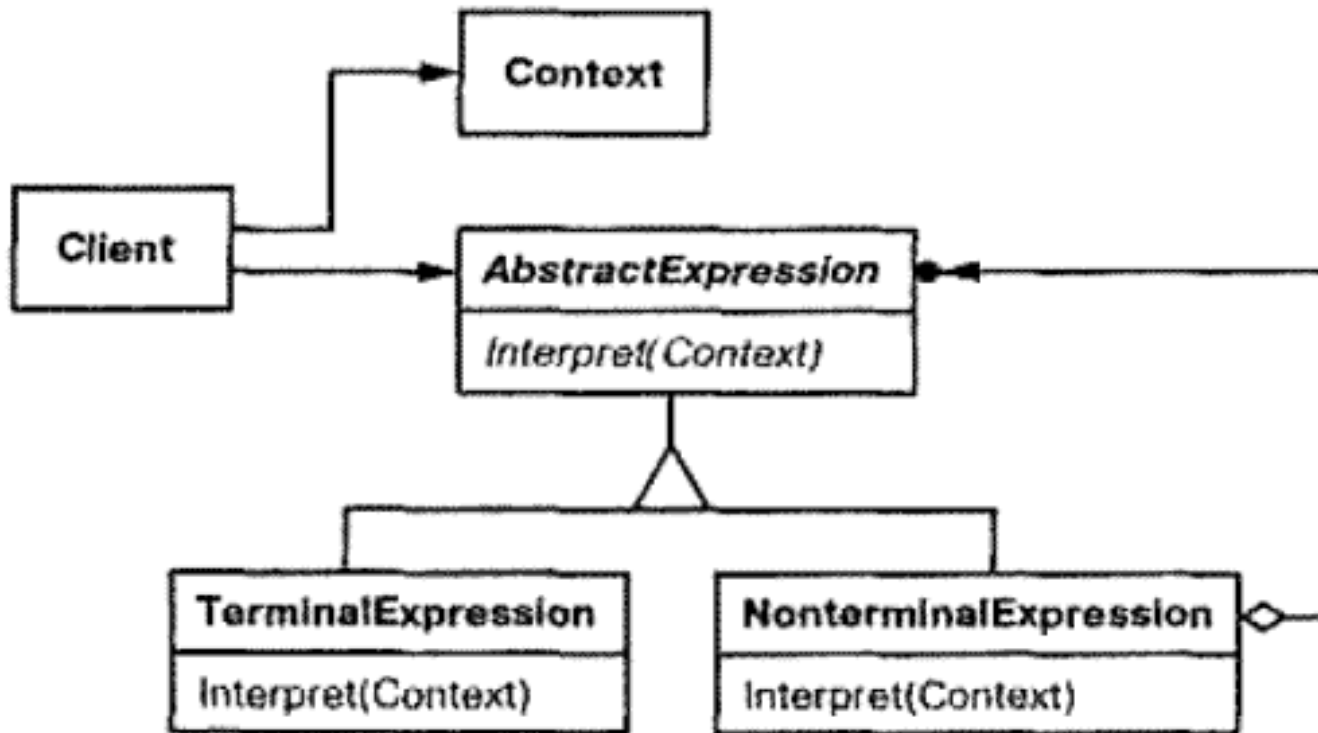
Большое количество реакций

- Изучено около 100 статей
- Выделено более 80 реакций
- Возможно образование различных фаз
- Отсутствие полных моделей
- Сложность кодирования реакций

Идея



Шаблон Интерпретатор



Domain Specific Language

```
elements
  atom H, valence: 1
  atom C, valence: 4

dimensions
  temperature 'K'
  concentration 'mol/cm3'
  energy 'kcal/mol'
  rate '1/s'
  time 's'

run
  termination H
  total_time 1
```

DSL: Γα3

```
gas
  spec :hydrogen
    atoms h: H
    # the second atom specifies by run::termination

  spec :methane
    atoms c: C

#  spec :ethylene
#    atoms c1: C, c2: C
#    dbond :c1, :c2

  concentration hydrogen(h: *), 1e-9
  concentration methane(c: *), 1e-10
#  concentration ethylene(c1: *, c2: *), 5-e11

  temperature 1200
```

DSL: Поверхность

surface

```
lattice :d, cpp_class: Diamond
```

```
spec :bridge
```

```
atoms ct: C%d, cl: bridge(:ct), cr: bridge(:ct)
```

```
bond :ct, :cl, face: 110, dir: :front
```

```
bond :ct, :cr, face: 110, dir: :front
```

```
position :cl, :cr, face: 100, dir: :front
```

```
spec :high_bridge
```

```
atoms ch: methane(:c), ct: bridge(:ct)
```

```
dbond :ch, :ct
```

```
spec :dimer
```

```
atoms cl: bridge(:ct), cr: bridge(:ct)
```

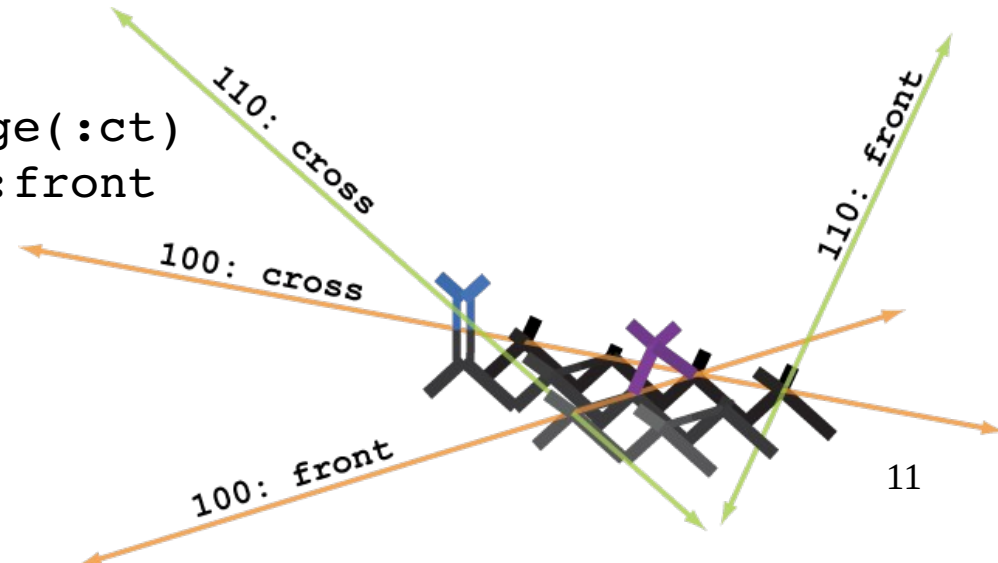
```
bond :cl, :cr, face: 100, dir: :front
```

```
# ...
```

```
size x: 100, y: 100
```

```
composition C%d
```

```
temperature 1000
```



DSL: Реакции

events

```
reaction 'surface activation'
```

```
equation H + hydrogen(h: *) = * + hydrogen
```

```
activation 6.65
```

```
forward_rate 5.2e13, 'cm3/(mol * s)'
```

```
reaction 'methyl adsorption to dimer'
```

```
equation dimer(cr: *) + methane(c: *) = methyl_on_dimer
```

```
enthalpy -73.6
```

```
activation 0
```

```
forward_rate 1e13, 'cm3/(mol * s)'
```

```
reverse_rate 5.3e3
```

```
reaction 'methyl desorption'
```

```
equation methyl_on_bridge = bridge(ct: *) + methane(c: *)
```

```
refinement 'from bridge'
```

```
incoherent methyl_on_bridge(:cb)
```

```
forward_rate 1.7e7
```

```
refinement 'from face 111'
```

```
forward_rate 5.4e6
```

```
activation 0
```

DSL: Окружение

```
environment :dimers_row
  targets :one_atom, :two_atom
  aliases left: dimer, right: dimer

  where :end_row, 'at end of dimers row'
    position one_atom, left(:cl), face: 100, dir: :cross
    position two_atom, left(:cr), face: 100, dir: :cross

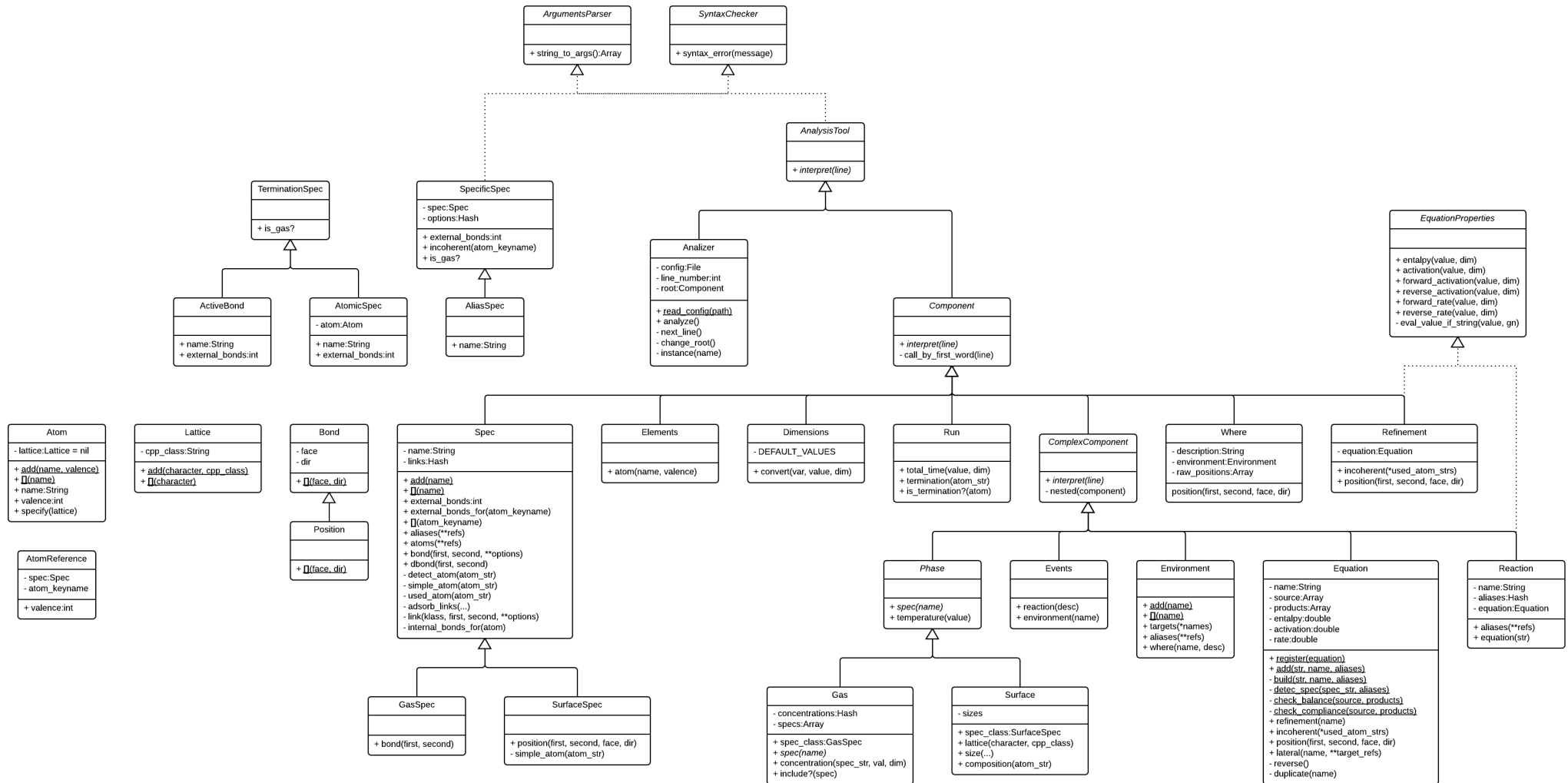
  where :mid_row, 'in middle of dimers row'
    use :end_row
    position one_atom, right(:cl), face: 100, dir: :cross
    position two_atom, right(:cr), face: 100, dir: :cross
```



DSL: Реакция с латеральными взаимодействиями

```
reaction 'dimer formation between incoherent bridge and fixed bridge'  
  aliases one: bridge, two: bridge  
  equation one(ct: *) + two(cr: *) = dimer  
    incoherent one(:ct)  
  
  refinement 'not in dimers row'  
    enthalpy -29.4  
    activation 4  
  
  lateral :dimers_row, one_atom: one(:ct), two_atom: two(:cr)  
  
  there :mid_row  
    enthalpy -13.6  
    forward_activation 0.7  
    reverse_activation 4.2  
  
  there :end_row  
    enthalpy -21.5  
    forward_activation 2.7  
    reverse_activation 4.1  
  
  forward_rate 7.5e11  
  reverse_rate 1.2e11
```

Структура анализатора



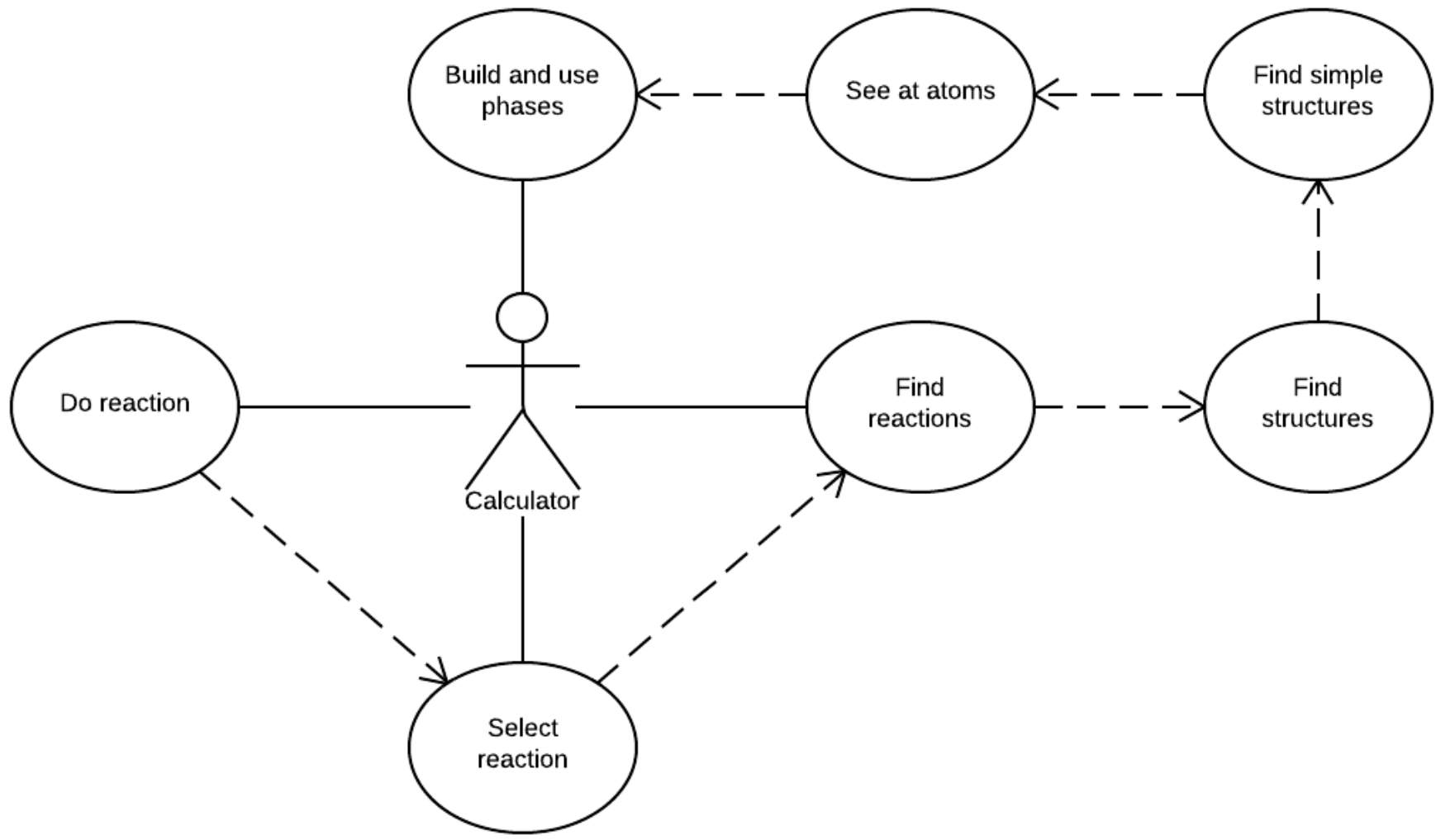
Результат работы интерпретатора

- Настройка фабрики атомов
- Классы и зависимости структур
- Классы и зависимости реакций
- Классы окружений
- Рецепты поиска

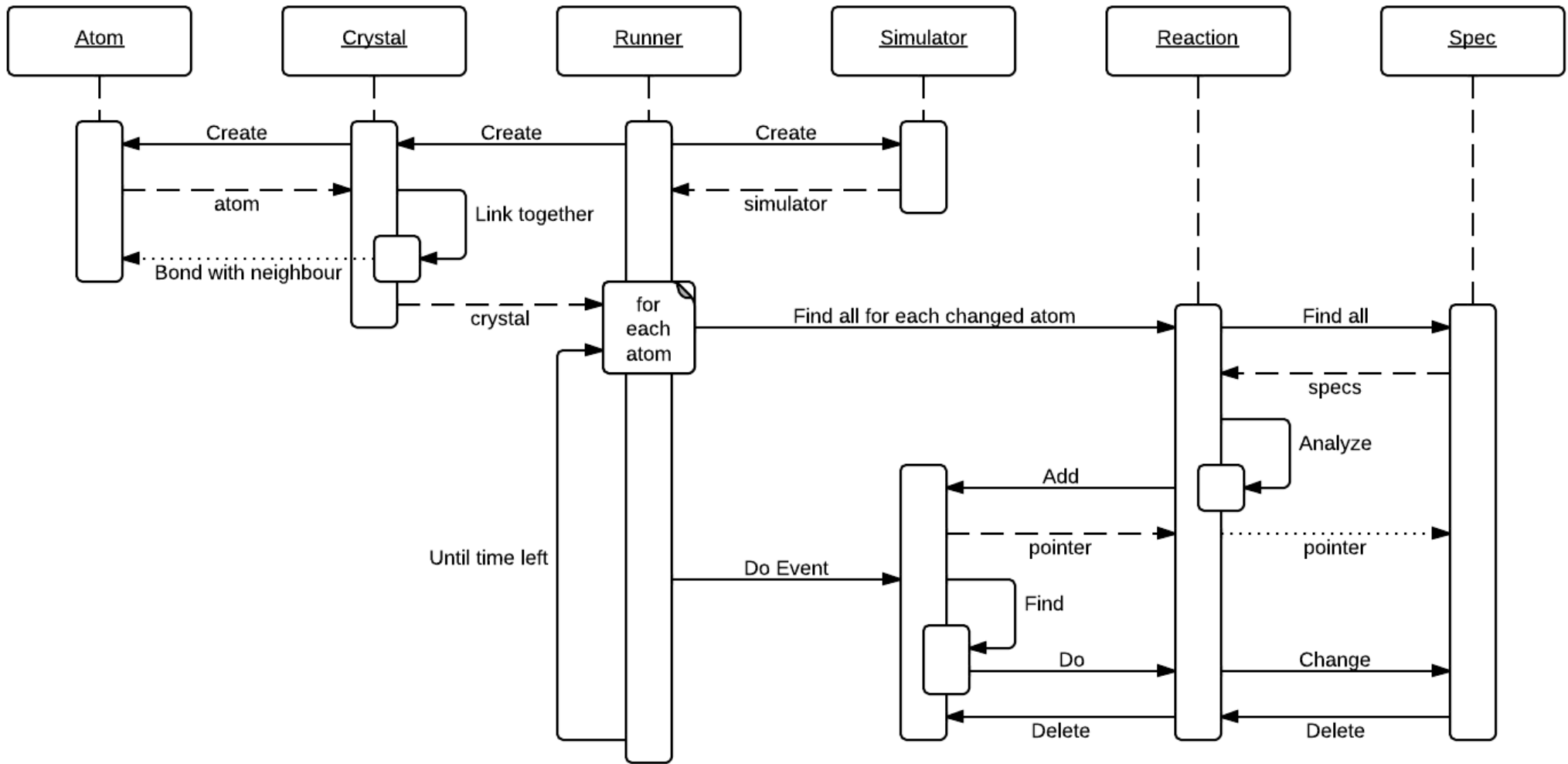
Каркас программы расчёта

- Класс атома
- Базовый класс кристаллических решёток
- Базовый класс структур
- Базовый класс реакций
- Базовый класс окружений
- Базовые фабрики для атомов, структур, реакций и окружений
- Метод Монте-Карло

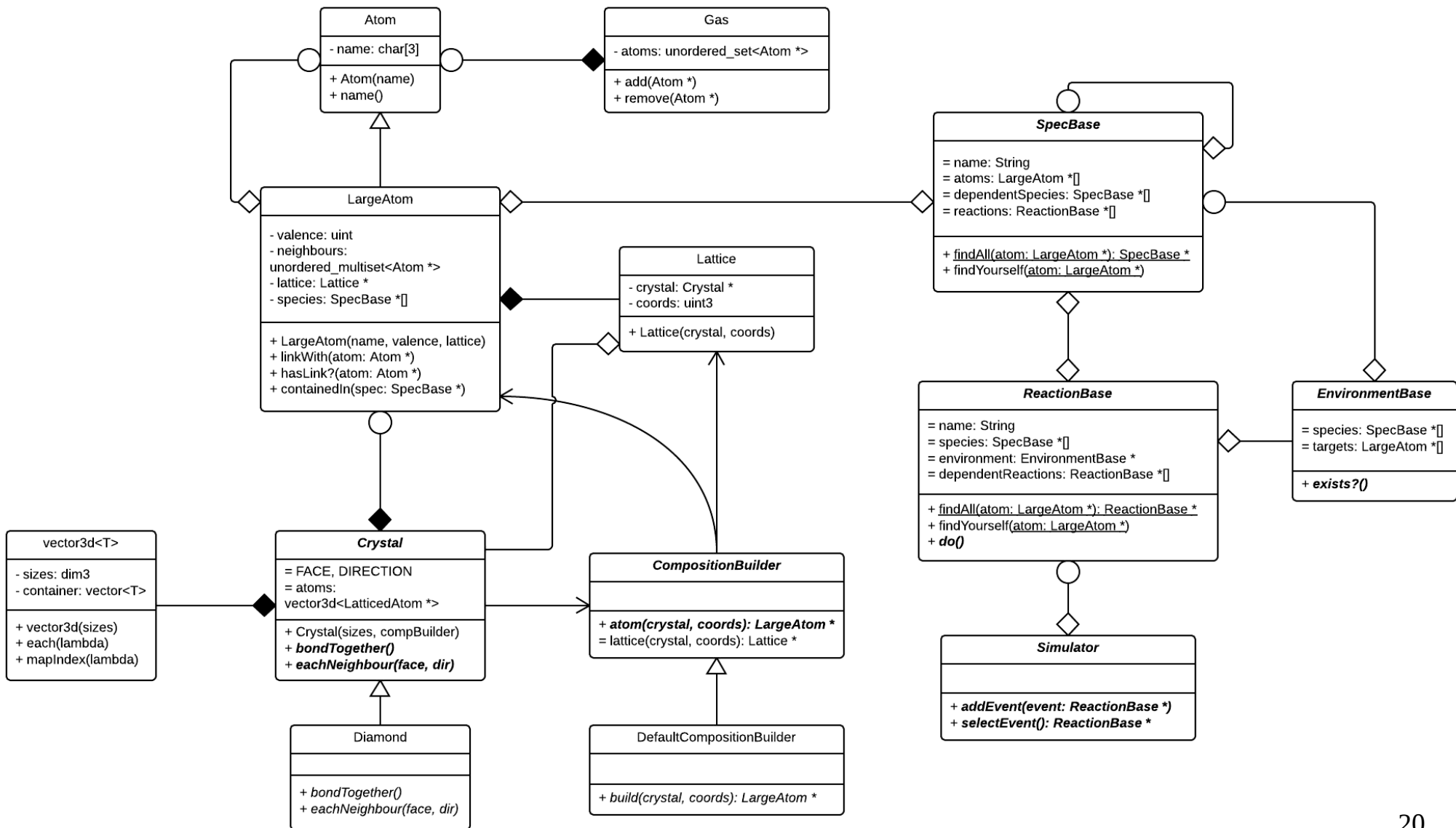
Ситуации



ВЫЗОВЫ



Начало :)



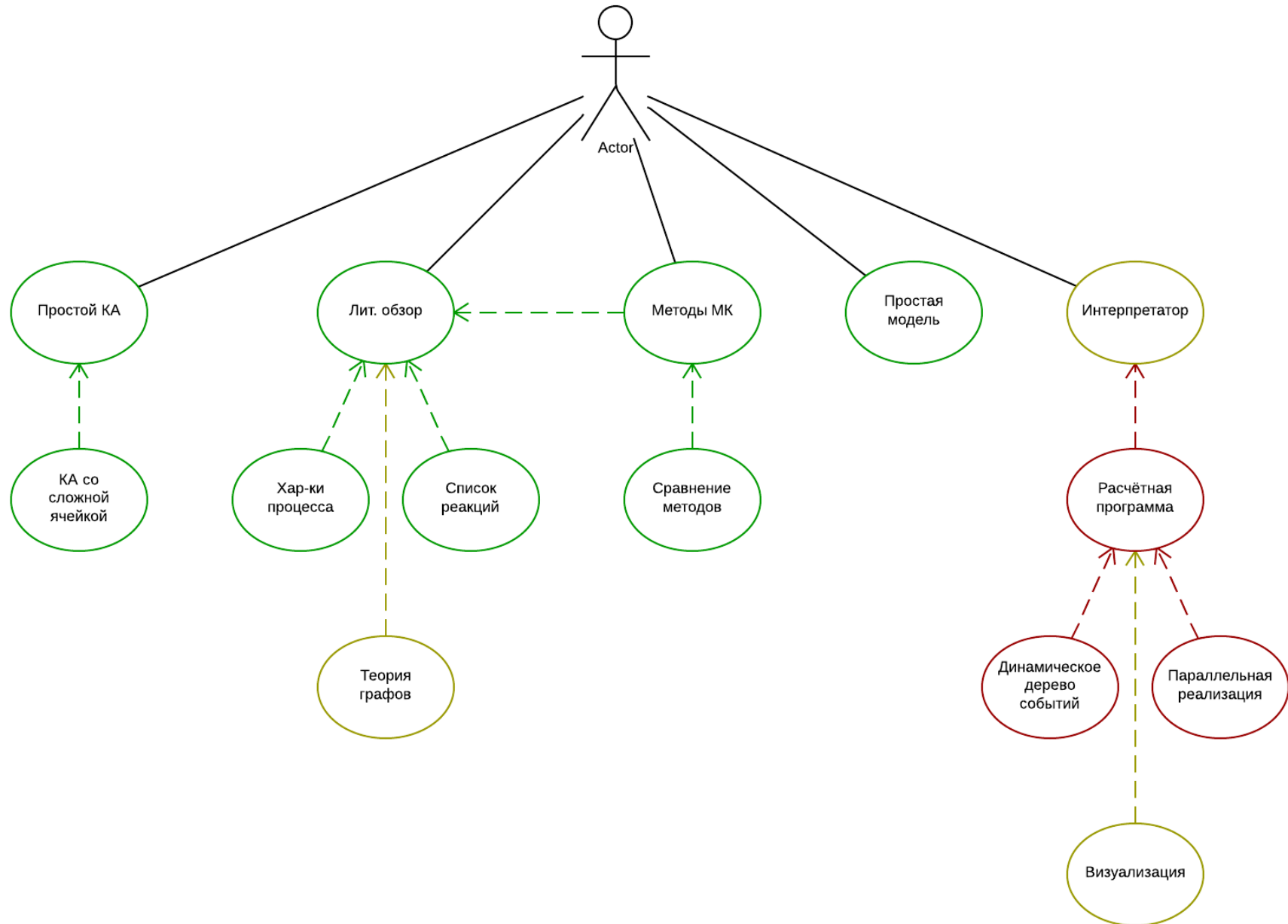
Первоочередные задачи

- Выявить структуру подключения окружений
- Строить лес зависимостей
- Формализовать алгоритм поиска на решётке
- Решить проблему хранения указателей
- Реализовать базовые классы

Параллельное выполнение

- Инициализация и связывание атомов
- Анализ каждого атома
- Поиск структур
- Поиск реакций
- Обновление дерева событий

Огород



Спасибо за внимание



github.com/newmen/versatile-diamond