



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):

2025661836

Дата регистрации: 13.05.2025

Номер и дата поступления заявки:

2025619796 24.04.2025

Дата публикации и номер бюллетеня:

13.05.2025 Бюл. № 5

Автор(ы):

Карцев Алексей Иванович (RU),

Кущук Леонид Ильич (RU)

Правообладатель(и):

федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (RU)

Название программы для ЭВМ:

Программа расчета структурных состояний и параметров решеток кристаллических материалов методом NEB

Реферат:

Программа предназначена для моделирования и анализа структурных фазовых переходов в материалах, отличающаяся новым подходом к применению метода nudged elastic band (NEB). Применение метода NEB позволяет определить последовательность промежуточных конфигураций, через которые система проходит при переходе из одного стабильного состояния в другое. Программа позволяет детально исследовать процесс перехода, рассчитывая промежуточные структурные состояния ячейки материала, и, что принципиально важно, адаптируя размеры решетки на каждом шаге. В отличие от традиционного применения NEB, где решетка обычно фиксируется, данная программа учитывает изменение параметров решетки в процессе фазового перехода, что позволяет моделировать более реалистичные сценарии превращений в материалах и получать более точные результаты.

Язык программирования: Python

Объем программы для ЭВМ: 79,6 МБ