

(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国际局

(43) 国际公布日
2025 年 2 月 13 日 (13.02.2025)



(10) 国际公布号
WO 2025/030751 A1

- (51) 国际专利分类号:
G01N 13/00 (2006.01) *G06F 17/10* (2006.01)
G06F 30/20 (2020.01) *G06F 119/08* (2020.01)
- (21) 国际申请号: PCT/CN2023/141322
- (22) 国际申请日: 2023 年 12 月 23 日 (23.12.2023)
- (25) 申请语言: 中文
- (26) 公布语言: 中文
- (30) 优先权:
202311002028.4 2023年8月9日 (09.08.2023) CN
- (71) 申请人: 中国科学院深圳先进技术研究院 (SHENZHEN INSTITUTES OF ADVANCED TECHNOLOGY CHINESE ACADEMY OF SCIENCES) [CN/CN]; 中国广东省深圳市

南山区深圳大学城学苑大道 1068 号, Guangdong 518055 (CN)。

(72) 发明人: 刘锋 (LIU, Feng); 中国广东省深圳市南山区深圳大学城学苑大道 1068 号, Guangdong 518055 (CN)。薛冬峰 (XUE, Dongfeng); 中国广东省深圳市南山区深圳大学城学苑大道 1068 号, Guangdong 518055 (CN)。陈昆峰 (CHEN, Kunfeng); 中国广东省深圳市南山区深圳大学城学苑大道 1068 号, Guangdong 518055 (CN)。

(74) 代理人: 北京中巡通大知识产权代理有限公司 (BEIJING ZHONG XUN TONG DA INTELLECTUAL PROPERTY AGENCY CO., LTD.); 中国北京市西城区西直门外大街 1 号院 2 号楼 7 层 7C1, Beijing 100044 (CN)。

(81) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的国家保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG,

(54) Title: INTERFACE STRUCTURE CHARACTERIZATION METHOD AND SYSTEM, ELECTRONIC DEVICE, AND STORAGE MEDIUM

(54) 发明名称: 一种界面结构表征方法、系统、电子设备及存储介质

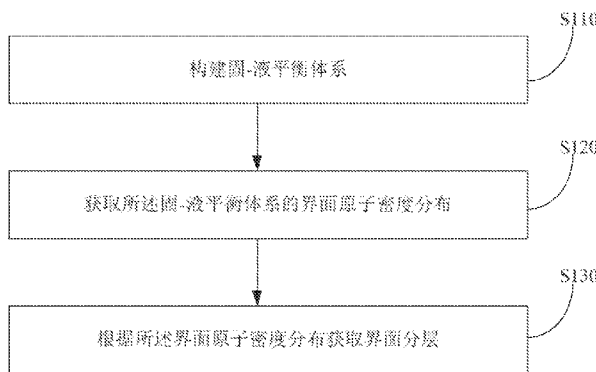


图 1

- S110 Construct a solid-liquid equilibrium system
S120 Acquire interfacial atomic density distribution of the solid-liquid equilibrium system
S130 Acquire interface layers on the basis of the interfacial atomic density distribution

(57) Abstract: An interface structure characterization method, comprising: constructing a solid-liquid equilibrium system; acquiring interfacial atomic number density distribution of the solid-liquid equilibrium system; and acquiring interface layers on the basis of the interfacial atomic number density distribution. Compared with previous qualitative characterization methods, characterization parameters of interface structure changes are developed on the basis of computation results of radial distribution functions in interface layers, and the parameters can quantitatively characterize the change characteristics of the interface structure, avoiding the situation where the interface structure can only be qualitatively characterized; the present application can be used for quantitatively characterizing interface structures, can characterize differences in interface structures caused by lattice periodic fields when crystals of different orientations

BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW。

- (84) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

本国际公布:

— 包括国际检索报告(条约第21条(3))。

come into contact with melts, structural adjustments needed from melts to crystal melts, and change processes from melts to crystal structures (sudden or gradual changes).

(57) 摘要: 一种界面结构表征方法, 通过构建固-液平衡体系, 获取该固-液平衡体系的界面原子数密度分布, 根据该界面原子数密度分布获取界面分层, 相较于之前的定性表征方法, 基于界面层内径向分布函数的计算结果, 开发了界面结构变化的表征参数, 该参数可以定量的表征界面结构的变化特征, 避免了只能定性表征界面结构的局面, 可以用于定量表征界面结构, 可表征不同晶体取向与熔体接触时由于晶格周期场导致的界面结构的差异大小、从熔体到晶体熔体需要做多大的结构调整、从熔体到晶体结构的变化过程(突变或渐变)。

一种界面结构表征方法、系统、电子设备及存储介质

技术领域

本申请涉及材料计算技术领域，特别涉及一种界面结构表征方法、仿真系统、电子设备及计算机可读存储介质。

背景技术

单晶材料是医疗、高端制造、半导体、国防等领域的基础，对现代社会具有重大意义。揭示晶体的生长机制，理解不同外界条件对晶体生长的作用规律，是突破高质量大尺寸单晶制备的关键，一直受到学术界以及产业界的关注。通过分子模拟技术，分析固-液界面结构是一种揭示晶体生长机制的重要手段。

在界面结构表征方面目前常见的如下：

1. 垂直界面方向上的密度分布

该方法主要是表征固-液界面处，在垂直界面方向上的层状原子结构。如图1所示，在晶体中一般呈现出周期起伏的密度分布，这是晶体长程有序性的表现。在液体部分，数密度呈现出一条平稳的直线，这是液体中结构无序的体现。在界面处，从晶体到熔体，离子数密度的波动逐渐减弱。这是从晶体的有序过渡到液体无序的体现。具体的过渡形式与具体的体系相关。在多元体系中除了界面处的结构序外，还可能存在化学序。结构序和化学序的竞争可能导致界面复杂的结构。

2. 层内原子径向分布函数

在固-液界面中，晶体附近的液体一般都会呈现出层状的有序结构。层内原子指的是平行界面方向上，图1中每一层内原子。通过计算这些层内原子之间的径向分布函数，表征平行界面方向上的结构特征。在晶体中，由于长程有序的存在，径向分布函数一般呈现出某种周期的振荡。在液体中，由于没有长程序，径向分布函数只存在零附近的几个峰。而在界面处，径向分布函数则处于二者的过渡状态，长程的波动逐渐减弱，短程的波动被保留。径向分布可作为界面结构定性表征的一种方式。

3. 层内原子二维密度与 X-RD 模拟

为了更直观的表征层内原子的二维结构，二维密度以及基于二维密度的

X-RD 模拟也是常用的一种方法。二维密度与界面数密度类似，在一段时间内计算面内二维原子密度，获得面内原子的分布图样。在此基础上，对二维密度进行傅里叶变换即可获得 X-RD 模拟结果，这能与实验直接对比。

以上这些方法都只是定性的表征方法，能定性的理解界面的结构变化特征，不能量化界面结构的变化特征，以至于现有研究大多是定性研究，无法更进一步揭示界面结构与晶体生长机制之间的关系。

发明内容

鉴于此，有必要针对现有存在的无法定量表征的技术缺陷提供一种可以定量的表征界面结构的变化特征的界面结构表征方法、仿真系统、电子设备及计算机可读存储介质。

为解决上述问题，本申请采用下述技术方案：

本申请目的之一，提供了一种界面结构表征方法，包括下述步骤：

构建固-液平衡体系；

获取所述固-液平衡体系的界面原子数密度分布；

根据所述界面原子密度分布获取界面分层。

在其中一些实施例中，在构建固-液平衡体系的步骤中，具体包括下述步骤：

建立 $10 \times 10 \times 10$ 倍晶格常数的晶胞，在等温等压系综下，进行升温模拟；

在某个时刻体系能量或体积发生跳变，记录体系此时的温度 T_1 ；

在预估熔点以下按照 100K 的间隔取 5 个温度，在预估熔点以上按照 100K 的间隔取 5 个温度，在每个温度下，利用等温等压系综计算平衡晶格常数；

用三阶或四阶多项式拟合晶格常数与温度的关系；

建立一个在 Z 方向上边长是 X 或 Y 方向上边长的三倍的模拟盒子，固定中间部分的原子，在高于熔点 1000K 的等温等压体系下弛豫，待放开部分融化后，放开中间固定部分的原子，在等温等焓系综下，结合晶格常数与温度的关系，迭代平衡体系。

在其中一些实施例中，在获取所述固-液平衡体系的界面原子数密度分布的步骤中，具体包括下述步骤：

根据所述平衡体系，在等温等压系综下平衡体系，通过拟合处置界面方向上模拟盒子的长度，获得垂直界面方向上的体系的平衡长度，通过调整模拟盒子边长，将所述平衡体系转为等温等体积系综，利用所述等温等体积系综的数据，在垂直界面方向上以 $0.1\text{\AA}$ 划分多个薄层，计算每个薄层中的原子数密度，

获得界面原子密度分布。

在其中一些实施例中，在根据所述界面原子密度分布获取界面分层的步骤中，具体包括下述步骤：

根据参考层 g_{refer} ，计算层间的径向分布函数的偏差 Deviation，计算公式如下：

$$Deviation(i) = \int_0^{r_{cut}} |g(i) - g_{refer}| dr \quad \#(1)。$$

$g(i)$ 为第 i 个薄层中的面内径向分布函数， g_{refer} 为某个薄层内的径向分布函数，该薄层可以是晶体、熔体、界面附近的任何薄层，以该函数作为参考值，计算偏差。在其中一些实施例中，在根据参考层 g_{refer} ，计算层间的径向分布函数的偏差 Deviation 的步骤中，所述参考层包括界面附近晶体中的某一层、界面附近熔体中的一层或近邻层。

在其中一些实施例中，当所述参考层为近邻层时，在选取近邻层之前首先对界面各层编号，从界面附近晶体的某层开始编号为1，直到熔体中看不到明显的原子密度波动，在选择所述近邻层作为参考层时， $g(i)$ 的层数比 g_{refer} 大一

层。

本申请目的之二，提供了一种所述的界面结构表征方法的表征系统，包括：
体系构建单元，用于构建固-液平衡体系；

界面原子密度分布单元，用于获取所述固-液平衡体系的界面原子密度分布；
界面分层单元，用于根据所述界面原子密度分布获取界面分层。

本申请目的之三，提供了一种电子设备，包括处理器、存储器和通信接口，所述存储器存储有一个或多个程序，并且所述一个或多个程序由所述处理器执行，所述一个或多个程序包括用于执行如任一项所述的方法中的步骤的指令。

本申请目的之四，提供一种计算机可读存储介质，所述计算机可读存储介质存储用于电子数据交换的计算机程序，其中，所述计算机程序使得计算机执行所述的方法的步骤。

本申请采用上述技术方案，其有益效果如下：

本申请提供的界面结构表征方法、系统、电子设备及计算机可读存储介质，通过构建固-液平衡体系，获取所述固-液平衡体系的界面原子数密度分布，根据所述界面原子密度分布获取界面分层，相较于之前的定性表征方法，本申请基于界面层内径向分布函数的计算结果，开发了界面结构变化的表征参数，该参数可以定量的表征界面结构的变化特征，避免了只能定性表征界面结构的局面，可以用于定量表征界面结构，可表征不同晶体取向与熔体接触时由于晶格周期场导致的界面结构的差异大小、从熔体到晶体熔体需要做多大的结构调整、从熔体到晶体结构的变化过程（突变或渐变），可广泛用于晶体生长过程中界

面结构表征，可适用金属单质、多元金属、金属氧化物、非金属单质、非金属化合物等材料体系的固-液界面结构表征。

附图说明

为了更清楚地说明本申请实施例的技术方案，下面将对本申请实施例或现有技术描述中所需要使用的附图作简单地介绍，显而易见地，下面所描述的附图仅仅是本申请的一些实施例，对于本领域普通技术人员来讲，在不付出创造性劳动的前提下，还可以根据这些附图获得其他的附图。

图 1 为本发明实施例 1 提供的界面结构表征方法的步骤流程图。

图 2 为本发明实施例 1 提供的界面结构表征方法的原理示意图。

图 3 为本发明实施例 1 提供的蓝宝石体系中，沿 C 轴方向上的铝原子和氧原子数密度分布。

图 4 为本发明实施例 1 提供的氧化铝的 c ， a 和 m -axis 三个体系中，固-液界面数密度分布以及层间径向分布函数偏差。

图 5 为本发明实施例 1 提供的蓝宝石的 c ， a 和 m -axis 三个体系模拟生长结果。

图 6 为本发明实施例 2 提供的界面结构表征系统的结构示意图。

图 7 为本发明实施例 2 提供的激光晶体钕铝石榴石 YAG 界面结构表征结构示意图与密度以及层间径向分布函数偏差。

图 8 为本发明实施例 3 提供的电子设备的结构示意图。

具体实施方式

下面详细描述本申请的实施例，所述实施例的示例在附图中示出，其中自始至终相同或类似的标号表示相同或类似的元件或具有相同或类似功能的元件。下面通过参考附图描述的实施例是示例性的，旨在用于解释本申请，而不能理解为对本申请的限制。

在本申请的描述中，需要理解的是，术语“上”、“下”、“水平”、“内”、“外”等指示的方位或位置关系为基于附图所示的方位或位置关系，仅是为了便于描述本申请和简化描述，而不是指示或暗示所指的装置或元件必须具有特定的方位、以特定的方位构造和操作，因此不能理解为对本申请的限制。

此外，术语“第一”、“第二”仅用于描述目的，而不能理解为指示或暗

示相对重要性或者隐含指明所指示的技术特征的数量。由此，限定有“第一”、“第二”的特征可以明示或者隐含地包括一个或者更多个该特征。在本申请的描述中，“多个”的含义是两个或两个以上，除非另有明确具体的限定。

为了使本申请的目的、技术方案及优点更加清楚明白，以下结合附图及实施例，对本申请进行进一步详细说明。

实施例 1

请参阅图 1 及图 2，分别为本实施例提供的界面结构表征方法的步骤流程图及原理示意图，包括下述步骤 S110 至步骤 S130，以下详细说明各个步骤的具体实现方式。

步骤 S110：构建固-液平衡体系。

在本实施例中，构建固-液平衡体系具体包括：

先建立一个 $10 \times 10 \times 10$ 倍晶格常数的晶胞，在等温等压系综下，进行升温模拟。在模拟过程中，观察体系能量或者体积随时间的变化。在某个时刻体系能量或体积发生跳变，记录体系此时的温度 $T1 = 3200$ 。体系的预估熔点约等于 $T1 - 0.1 * T1 = 2680$ K，该值作为计算晶格常数与体积的依据。然后，在预估熔点以下按照 100K 的间隔取 5 个温度，在预估熔点以上按照 100K 的间隔取 5 个温度，在每个温度下，利用等温等压系综计算平衡晶格常数。用三阶或四阶多项式拟合晶格常数与温度的关系。最后，建立一个在 Z 方向上边长是 X 或 Y 方向上边长的三倍的模拟盒子，固定中间部分的原子，在高于熔点 1000K 的等温等压体系下弛豫。待放开部分融化后，放开中间固定部分的原子，在等温等压系综下，结合晶格常数与温度的关系，迭代平衡体系。平衡后体系所处的温度就为熔点。

步骤 S120：获取所述固-液平衡体系的界面原子密度分布。

在本实施例中，在获取所述固-液平衡体系的界面原子密度分布的步骤中，具体包括下述步骤：根据所述平衡体系，在等温等压系综下平衡体系，通过拟合处置界面方向上模拟盒子的长度，获得垂直界面方向上的平衡长度，通过调整模拟盒子边长，将所述平衡体系转为等温等体积系综，利用所述等温等体积系综的数据，在垂直界面方向上以 $0.1\text{\AA}$ 划分多个薄层，计算每个薄层中的原子数密度，计算界面原子密度分布。

步骤 S130：根据所述界面原子密度分布获取界面分层。

在本实施例中，在根据所述界面原子密度分布获取界面分层的步骤中，具体包括下述步骤：

根据参考层 g_{refer} ，计算层间的径向分布函数的偏差 Deviation，计算公式如下：

$$Deviation(i) = \int_0^{r_{cut}} |g(i) - g_{refer}| dr \quad \#(1)。$$

$g(i)$ 为第 i 个薄层中的面内径向分布函数， g_{refer} 为某个薄层内的径向分布函数，该薄层为界面附近的近邻薄层，以该函数作为参考值，计算偏差。

可以理解，参考层的选取有多种，分别是界面附近晶体中的某一层、界面附近熔体中的一层、近邻层。这三种选取方式都能表征熔体结构是如何过渡到晶体结构的。第一和第二种选取的方式表达的含义相同，即界面中面内结构与晶体或熔体一层的结构差异，这两种选取方式更侧重于表征不同取向的晶面与熔体结构之间的差异。第三种是以近邻层作为参考层。在选取近邻层之前首先对界面各层编号，从界面附近晶体的某层开始编号为 1，直到熔体中看不到明显的原子密度波动。在选择近邻层作为参考层时， $g(i)$ 的层数比 g_{refer} 大一层。

采用上述方法在蓝宝石和钇铝石榴石体系中做了验证，该方法是可行，图 3 为在蓝宝石体系中，沿 C 轴方向上的铝原子和氧原子数密度分布。本实施例以近邻层参考层，通过定量计算界面层内径向分布函数函数的差异，如图 4 所示，蓝宝石 C 轴方向的界面属于结构突变界面，在一层的范围内，径向分布函数偏差值从零附近突变到最大值。如图 5 所示，虚线为晶体开始生长的位置，左侧为籽晶，右侧为新长晶体和熔体（蓝宝石的 c ， a 和 m -axis 三个体系模拟生长结果，其中 c -axis 不能按照籽晶晶格周期外延生长，其他两个方向可以）。后续的生长模拟也证明这两个体系不能按照籽晶晶格外延生长。通过选取晶体中的一层作为参考，计算表明，不同取向中，界面结构差异不同。

相较于之前的定性表征方法，本申请实施例 1 提供的界面结构表征方法，基于界面层内径向分布函数的计算结果，开发了界面结构变化的表征参数，该参数可以定量的表征界面结构的变化特征，避免了只能定性表征界面结构的局面，可以用于定量表征界面结构，可表征不同晶体取向与熔体接触时由于晶格周期场导致的界面结构的差异大小、从熔体到晶体熔体需要做多大的结构调整、从熔体到晶体结构的变化过程（突变或渐变）。突变体系难以按照籽晶晶格周期外延生长，而渐变体系可以按照籽晶晶格周期外延生长。突变体系指的是 $deviation$ 的值从最小值零附近，在一层的范围内变为整个界面范围中的最大值。

实施例 2

请参阅图 6，为本实施例 2 提供的界面结构表征系统的结构示意图，包括体系构建单元 110、界面原子密度分布单元 120 及界面分层单元 130。以下详细说明各个步骤的具体实现方式。

体系构建单元 110 用于构建固-液平衡体系。

在本实施例中，以构建钇铝石榴石 0001 方向的固-液平衡体系为例。构建固-液平衡体系具体包括：先建立一个 $10 \times 10 \times 10$ 倍晶格常数的晶胞，在等温

等压系综下，进行升温模拟。在模拟过程中，观察体系能量或者体积随时间的变化。在某个时刻体系能量或体积发生跳变，记录体系此时的温度 $T1 = 2700\text{ K}$ 。体系的预估熔点约等于 $T1 - 0.1 * T1 = 2430\text{ K}$ ，该值作为计算晶格常数与体积的依据。然后，在预估熔点以下按照 100 K 的间隔取 5 个温度，在预估熔点以上按照 100 K 的间隔取 5 个温度，在每个温度下，利用等温等压系综计算平衡晶格常数。用三阶或四阶多项式拟合晶格常数与温度的关系。最后，建立一个在 Z 方向上边长是 X 或 Y 方向上边长的三倍的模拟盒子，固定中间部分的原子，在高于熔点 1000 K 的等温等压体系下弛豫。待放开部分融化后，放开中间固定部分的原子，在等温等焓系综下，结合晶格常数与温度的关系，迭代平衡体系。平衡后体系所处的温度就为熔点。

界面原子数密度 120 计算用于获取所述固-液平衡体系的界面原子数密度分布。

在本实施例中，在获取所述固-液平衡体系的界面原子数密度分布的步骤中，具体包括下述步骤：根据所述平衡体系，在等温等压系综下平衡体系，通过拟合垂直界面方向上的模拟盒子边长，计算垂直界面方向上的平衡长度，通过调整模拟盒子边长，将所述平衡体系转为等温等体积系综，利用所述等温等体积系综的数据，在垂直界面方向上以 $0.1\text{ \AA}$ 划分多个薄层，计算每个薄层中的原子数密度，获得界面原子密度分布。

界面结构偏差的计算，根据所述界面原子密度分布获取界面分层计算结构偏差。

在本实施例中，在根据所述界面原子数密度分布获取界面分层的步骤中，具体包括下述步骤：

根据参考层 g_{refer} ，计算层间的径向分布函数的偏差 Deviation，计算公式如下：

$$Deviation(i) = \int_0^{r_{cut}} |g(i) - g_{refer}| dr \quad \#(1).$$

$g(i)$ 为第 i 个薄层中的面内径向分布函数， g_{refer} 为某个薄层内的径向分布函数，该薄层为界面附近的近邻薄层，以该函数作为参考值，计算偏差。

可以理解，参考层的选取有多种，分别是界面附近晶体中的某一层、界面附近熔体中的一层、近邻层。这三种选取方式都能表征熔体结构是如何过渡到晶体结构的。第一和第二种选取的方式表达的含义相同，即界面中面内结构与晶体或熔体一层的结构差异，这两种选取方式更侧重于表征不同取向的晶面与熔体结构之间的差异。第三种是以近邻层作为参考层。在选取近邻层之前首先对界面各层编号，从界面附近晶体的某层开始编号为 1，直到熔体中看不到明显的原子密度波动。在选择近邻层作为参考层时， $g(i)$ 的层数比 g_{refer} 大一层。

请参阅图 7，为本发明实施例 2 提供的激光晶体钕铝石榴石 YAG 界面结构

表征系统的结构示意图与密度以及层间径向分布函数偏差。

相较于之前的定性表征方法，本申请实施例 2 提供的界面结构表征系统，基于界面层内径向分布函数的计算结果，开发了界面结构变化的表征参数，该参数可以定量的表征界面结构的变化特征，避免了只能定性表征界面结构的局面，可以用于定量表征界面结构，可表征不同晶体取向与熔体接触时由于晶格周期场导致的界面结构的差异大小、从熔体到晶体熔体需要做多大的结构调整、从熔体到晶体结构的变化过程（突变或渐变）。突变体系难以按照籽晶晶格周期外延生长，而渐变体系可以按照籽晶晶格周期外延生长。突变体系指的是 deviation 的值从最小值零附近，在一层的范围内变为整个界面范围中的最大值。

实施例 3

请参阅图 8，图 8 是本申请实施例提供的一种电子设备的结构示意图，该医疗设备包括：一个或多个处理器、一个或多个存储器、一个或多个通信接口，以及一个或多个程序；所述一个或多个程序被存储在所述存储器中，并且被配置由所述一个或多个处理器执行。

上述程序包括用于执行以下步骤的指令：

构建固-液平衡体系；

获取所述固-液平衡体系的界面原子密度分布；

根据所述界面原子密度分布获取界面分层。

其中，上述方法实施例涉及的各场景的所有相关内容均可以援引到对应功能模块的功能描述，在此不再赘述。

应理解，上述存储器可以包括只读存储器和随机存取存储器，并向处理器提供指令和数据。存储器的一部分还可以包括非易失性随机存取存储器。例如，存储器还可以存储设备类型的信息。

在本申请实施例中，上述装置的处理器可以是中央处理单元（Central Processing Unit, CPU），该处理器还可以是其他通用处理器、数字信号处理器（DSP）、专用集成电路（ASIC）、现场可编程门阵列（FPGA）或者其他可编程逻辑器件、分立门或者晶体管逻辑器件、分立硬件组件等。通用处理器可以是微处理器或者该处理器也可以是任何常规的处理器等。

应理解，本申请实施例中涉及的“至少一个”是指一个或者多个，“多个”是指两个或两个以上。“和/或”，描述关联对象的关联关系，表示可以存在三种关系，例如，A 和/或 B，可以表示：单独存在 A，同时存在 A 和 B，单独存在 B 的情况，其中 A、B 可以是单数或者复数。字符“/”一般表示前后关联对象是一种“或”的关系。“以下至少一项(个)”或其类似表达，是指的这些项中的任意组合，包括单项(个)或复数项(个)的任意组合。例如，a、b、或 c 中

的至少一项(个),可以表示: a,b,c,a-b,a-c,b-c,或 a-b-c, 其中 a,b,c 可以是单个,也可以是多个。

以及,除非有相反的说明,本申请实施例提及“第一”、“第二”等序数词是用于对多个对象进行区分,不用于限定多个对象的顺序、时序、优先级或者重要程度。例如,第一信息和第二信息,只是为了区分不同的信息,而并不是表示这两种信息的内容、优先级、发送顺序或者重要程度等的不同。

在实现过程中,上述方法的各步骤可以通过处理器中的硬件的集成逻辑电路或者软件形式的指令完成。结合本申请实施例所公开的方法的步骤可以直接体现为硬件处理器执行完成,或者用处理器中的硬件及软件单元组合执行完成。软件单元可以位于随机存储器,闪存、只读存储器,可编程只读存储器或者电可擦写可编程存储器、寄存器等本领域成熟的存储介质中。该存储介质位于存储器,处理器执行存储器中的指令,结合其硬件完成上述方法的步骤。为避免重复,这里不再详细描述。

本申请实施例还提供一种计算机存储介质,其中,该计算机存储介质存储用于电子数据交换的计算机程序,该计算机程序使得计算机执行如上述方法实施例中记载的任一方法的部分或全部步骤。

本申请实施例还提供一种计算机程序产品,上述计算机程序产品包括存储了计算机程序的非瞬时性计算机可读存储介质,上述计算机程序可操作来使计算机执行如上述方法实施例中记载的任一方法的部分或全部步骤。该计算机程序产品可以为一个软件安装包。

需要说明的是,对于前述的各方法实施例,为了简单描述,故将其都表述为一系列的动作组合,但是本领域技术人员应该知悉,本申请并不受所描述的动作顺序的限制,因为依据本申请,某些步骤可以采用其他顺序或者同时进行。其次,本领域技术人员也应该知悉,说明书中所描述的实施例均属于优选实施例,所涉及的动作和模块并不一定是本申请所必须的。

在上述实施例中,对各个实施例的描述都各有侧重,某个实施例中沒有详述的部分,可以参见其他实施例的相关描述。

在本申请所提供的几个实施例中,应该理解到,所揭露的装置,可通过其它的方式实现。例如,以上所描述的装置实施例仅是示意性的,例如上述单元的划分,仅仅为一种逻辑功能划分,实际实现时可以有另外的划分方式,例如多个单元或组件可以结合或者可以集成到另一个系统,或一些特征可以忽略,或不执行。另一点,所显示或讨论的相互之间的耦合或直接耦合或通信连接可以是通过一些接口,装置或单元的间接耦合或通信连接,可以是电性或其它的形式。

上述作为分离部件说明的单元可以是或者也可以不是物理上分开的,作为单元显示的部件可以是或者也可以不是物理单元,即可以位于一个地方,或者

也可以分布到多个网络单元上。可以根据实际的需要选择其中的部分或者全部单元来实现本申请实施例方案的目的。

另外，在本申请各个实施例中的各功能单元可以集成在一个处理单元中，也可以是各个单元单独物理存在，也可以两个或两个以上单元集成在一个单元中。上述集成的单元既可以采用硬件的形式实现，也可以采用软件功能单元的形式实现。

上述集成的单元如果以软件功能单元的形式实现并作为独立的产品销售或使用时，可以存储在一个计算机可读取存储器中。基于这样的理解，本申请的技术方案本质上或者说对现有技术做出贡献的部分或者该技术方案的全部或部分可以以软件产品的形式体现出来，该计算机软件产品存储在一个存储器中，包括若干指令用以使得一台计算机设备（可为个人计算机、服务器或者 TRP 等）执行本申请各个实施例方法的全部或部分步骤。而前述的存储器包括：U 盘、只读存储器（ROM，Read-Only Memory）、随机存取存储器（RAM，Random Access Memory）、移动硬盘、磁碟或者光盘等各种可以存储程序代码的介质。

本领域普通技术人员可以理解上述实施例的各种方法中的全部或部分步骤是可以通程序来指令相关的硬件来完成，该程序可以存储于一计算机可读存储器中，存储器可以包括：闪存盘、ROM、RAM、磁盘或光盘等。

可以理解，以上所述实施例的各技术特征可以进行任意的组合，为使描述简洁，未对上述实施例中的各个技术特征所有可能的组合都进行描述，然而，只要这些技术特征的组合不存在矛盾，都应当认为是本说明书记载的范围。

以上仅为本申请的较佳实施例而已，仅具体描述了本申请的技术原理，这些描述只是为了解释本申请的原理，不能以任何方式解释为对本申请保护范围的限制。基于此处解释，凡在本申请的精神和原则之内所作的任何修改、等同替换和改进，及本领域的技术人员不需要付出创造性的劳动即可联想到本申请的其他具体实施方式，均应包含在本申请的保护范围之内。

权 利 要 求 书

1.一种界面结构表征方法，其特征在于，包括下述步骤：

构建固-液平衡体系；

获取所述固-液平衡体系的界面原子密度分布；

根据所述界面原子密度分布获取界面分层。

2.如权利要求1所述的界面结构表征方法，其特征在于，在构建固-液平衡体系的步骤中，具体包括下述步骤：

建立 $10 \times 10 \times 10$ 倍晶格常数的晶胞，在等温等压系综下，进行升温模拟；

在某个时刻体系能量或体积发生跳变，记录体系此时的温度 T_1 ；

在预估熔点以下按照 100K 的间隔取 5 个温度，在预估熔点以上按照 100K 的间隔取 5 个温度，在每个温度下，利用等温等压系综计算平衡晶格常数；

用三阶或四阶多项式拟合晶格常数与温度的关系；

建立一个在 Z 方向上边长是 X 或 Y 方向上边长的三倍的模拟盒子，固定中间部分的原子，在高于熔点 1000K 的等温等压体系下弛豫，待放开部分融化后，放开中间固定部分的原子，在等温等焓系综下，结合晶格常数与温度的关系，迭代平衡体系。

3.如权利要求1所述的界面结构表征方法，其特征在于，在获取所述固-液平衡体系的界面原子密度分布的步骤中，具体包括下述步骤：

根据所述平衡体系，在等温等压系综下平衡体系，通过拟合垂直界面方向上的模拟盒子边长，计算垂直界面方向上的平衡长度，通过调整模拟盒子边长，并将所述平衡体系转为等温等体积系综，利用所述等温等体积系综的数据，在垂直界面方向上以 $0.1\text{\AA}$ 划分多个薄层，计算每个薄层中的原子数密度，获得界面原子数密度分布。

4.如权利要求1所述的界面结构表征方法，其特征在于，在根据所述界面原子密度分布获取界面分层的步骤中，具体包括下述步骤：

根据参考层 g_{refer} ，计算层间的径向分布函数的偏差 Deviation，计算公式如下：

$$Deviation(i) = \int_0^{r_{cut}} |g(i) - g_{refer}| dr \quad \#(1);$$

$g(i)$ 为第 i 个薄层中的面内径向分布函数， g_{refer} 为某个薄层内的径向分布函数，该薄层可以是晶体、熔体、界面附近的任何薄层，以该函数作为参考值，计算偏差。

5.如权利要求 4 所述的界面结构表征方法，其特征在于，在根据参考层 g_{refer} ，计算层间的径向分布函数的偏差 Deviation 的步骤中，所述参考层包括界面附近晶体中的某一层、界面附近熔体中的一层或近邻层。

6.如权利要求 5 所述的界面结构表征方法，其特征在于，当所述参考层为近邻层时，在选取近邻层之前首先对界面各层编号，从界面附近晶体的某层开始编号为 1，直到熔体中看不到明显的原子密度波动，在选择所述近邻层作为参考层时， $g(i)$ 的层数比 g_{refer} 大一层。

7.一种如权利要求 1 所述的界面结构表征方法的表征系统，其特征在于，包括：

体系构建单元，用于构建固-液平衡体系；

界面原子薄层，用于获取所述固-液平衡体系的界面原子数密度分布；

界面分层单元，用于根据所述界面原子数密度分布获取界面分层。

8.一种电子设备，其特征在于，包括处理器、存储器和通信接口，所述存储器存储有一个或多个程序，并且所述一个或多个程序由所述处理器执行，所述一个或多个程序包括用于执行如权利要求 1-6 任一项所述的方法中的步骤的指令。

9.一种计算机可读存储介质，其特征在于，所述计算机可读存储介质存储用于电子数据交换的计算机程序，其中，所述计算机程序使得计算机执行如权利要求 1-6 任一项所述的方法的步骤。

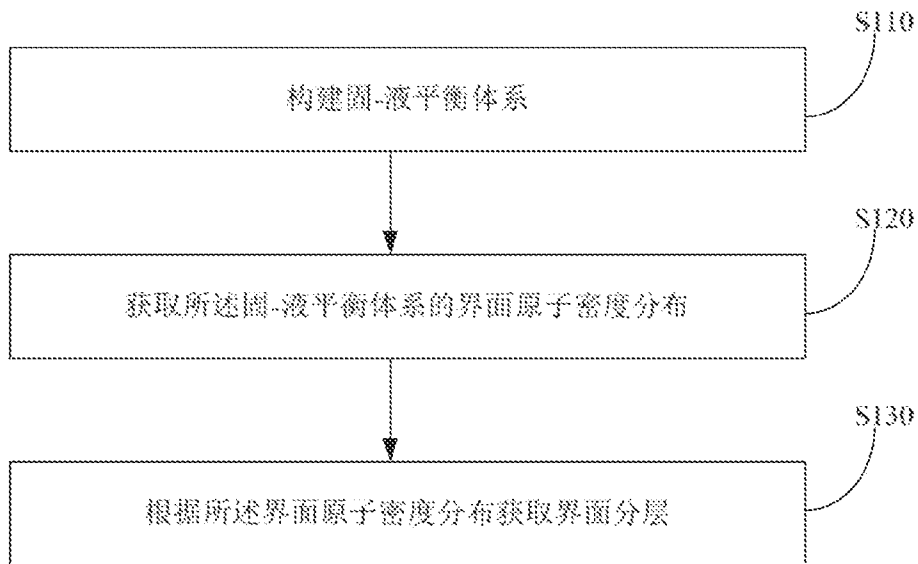


图 1

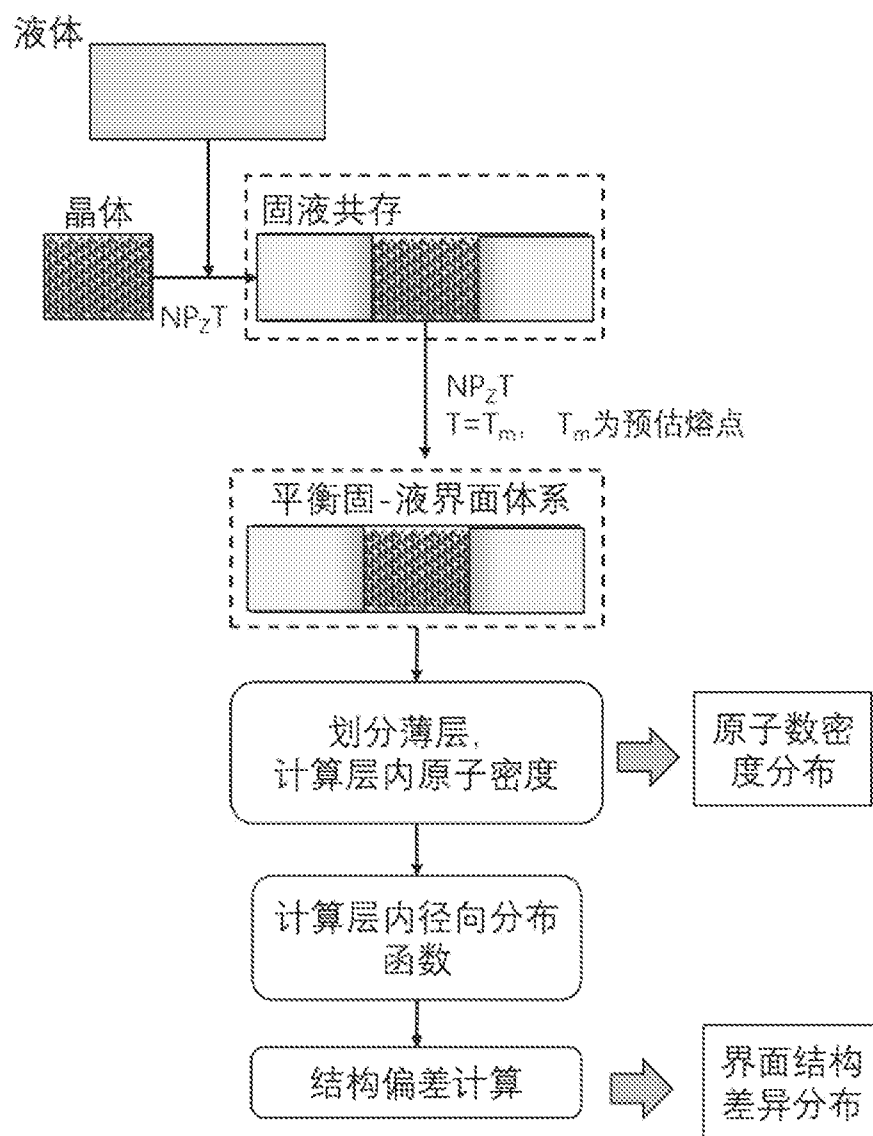


图 2

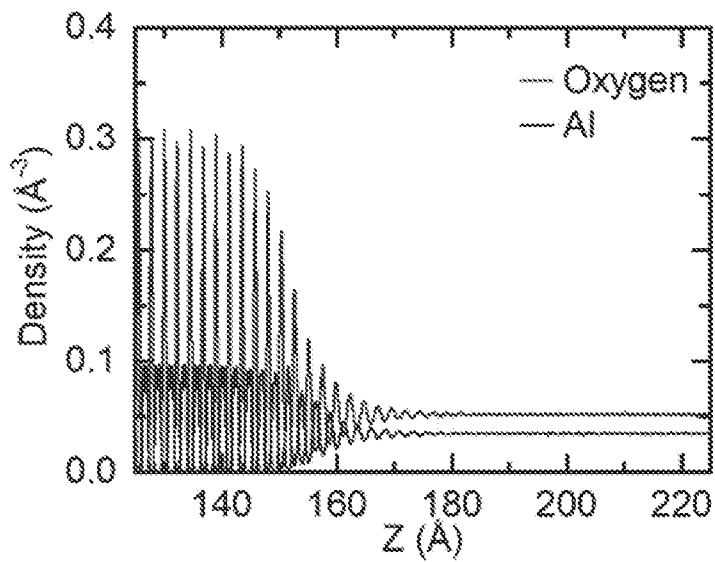


图 3

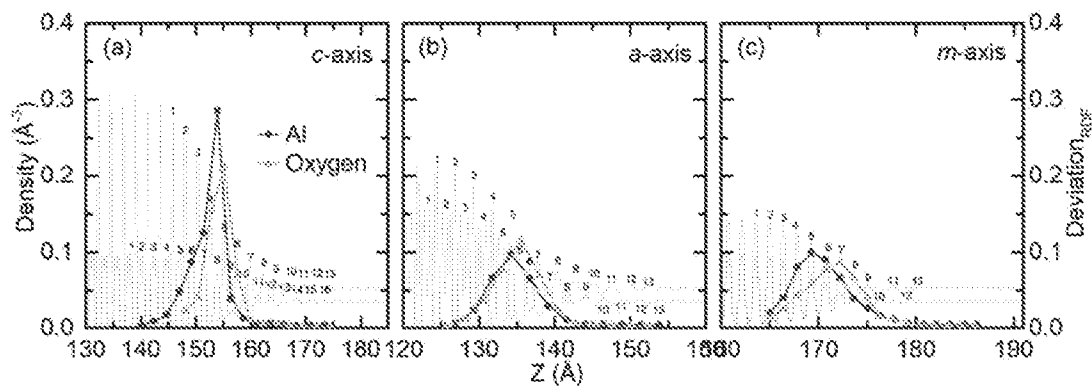


图 4

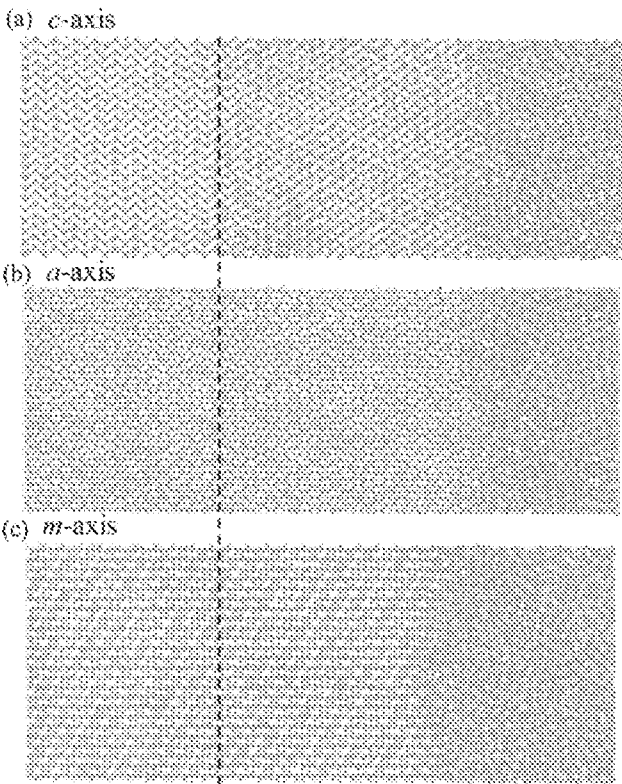


图 5

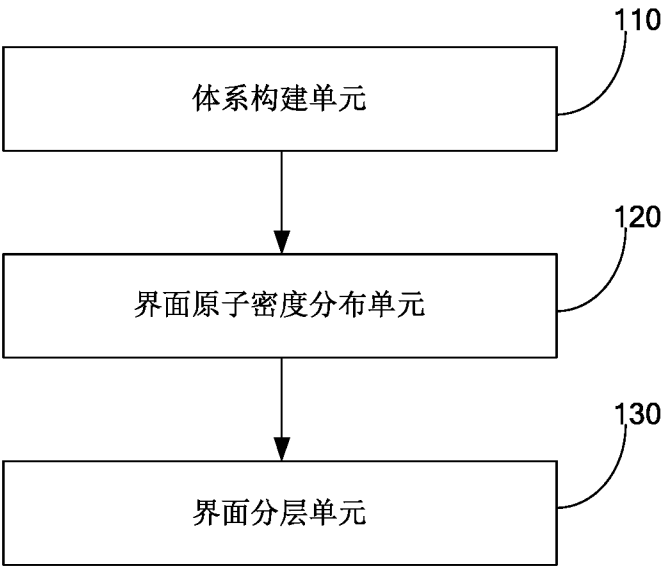


图 6

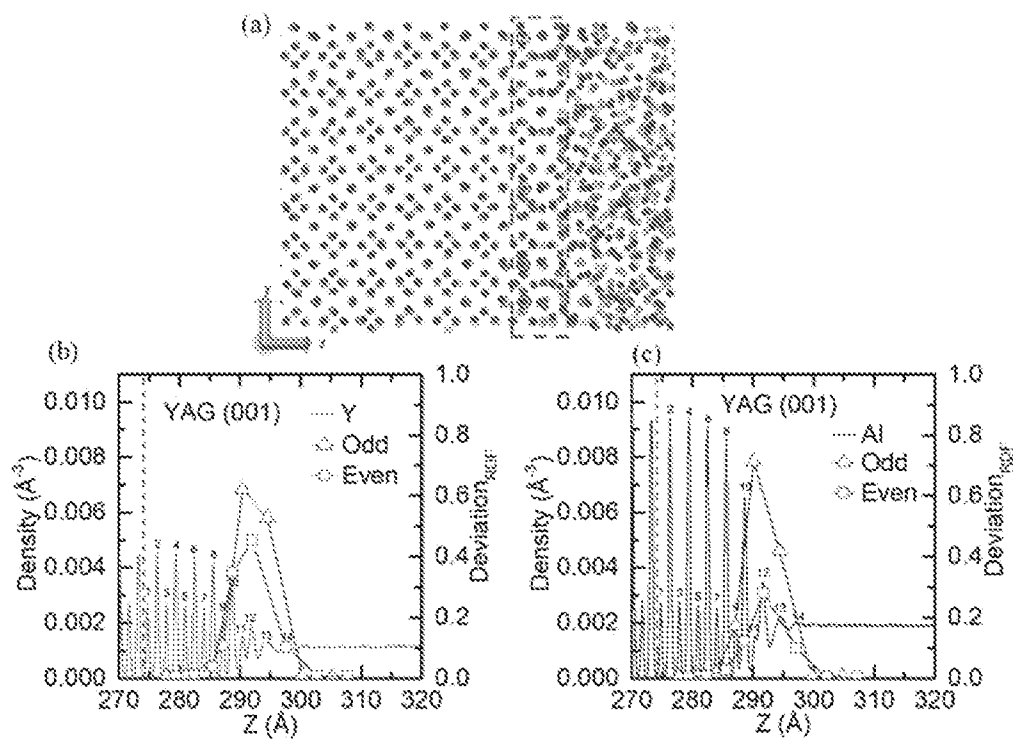


图 7

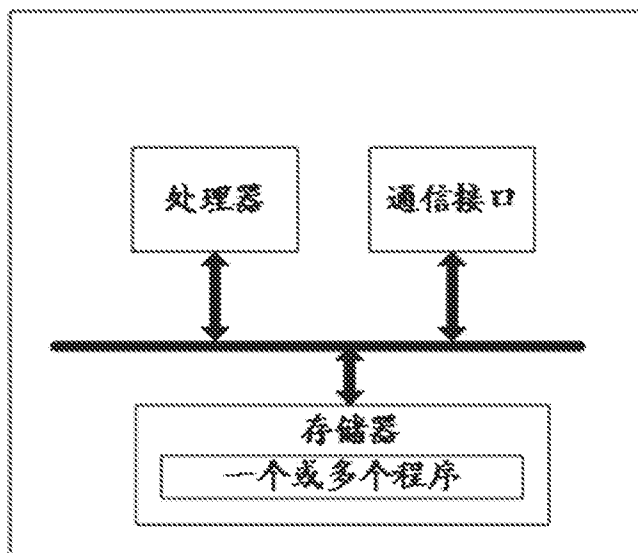


图 8

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/CN2023/141322

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G01N 13/00(2006.01)i; G06F30/20(2020.01)i; G06F17/10(2006.01)i; G06F119/08(2020.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC:G01N 13、G06F、G16C

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CNTEXT, ENTXT, ENTXTC, VEN, CNKI: 中国科学院深圳先进技术研究院, 刘锋, 薛冬峰, 陈昆峰, 界面结构, 固-液平衡体系, 界面原子数密度分布, 界面分层, 晶格常数, 晶胞, 等温等压系综, 温度, 熔点, 弛豫, 等温等焓系综, 垂直界面方向, 平衡长度, 薄层, 参考层, 径向分布函数, 偏差, 蓝宝石, 钇铝石榴石, 铝, 氧, interface structure, solid-liquid equilibrium system, interfacial atomic number density distribution, interfacial delamination, lattice constant, unit cell, isothermal isobaric Ensemble, temperature, melting point, relaxation, isothermal isenthalpic ensemble, vertical interface direction, equilibrium length, thin layer, reference layer, radial distribution function, deviation, sapphire, yttrium aluminum garnet, aluminium, oxygen

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
PX	CN 116818610 A (SHENZHEN INSTITUTES OF ADVANCED TECHNOLOGY, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES) 29 September 2023 (2023-09-29) claims 1-9	1-9
X	CN 116434882 A (SOUTH CHINA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY) 14 July 2023 (2023-07-14) description, paragraphs 7-46, and figure 2	1, 7-9
A	CN 114910540 A (SHENZHEN INSTITUTES OF ADVANCED TECHNOLOGY, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES) 16 August 2022 (2022-08-16) entire document	1-9
A	CN 115440319 A (YANGTZE RIVER DELTA RESEARCH INSTITUTE, UESTC (HUZHOU)) 06 December 2022 (2022-12-06) entire document	1-9

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
 “D” document cited by the applicant in the international application
 “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date
 “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
 “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
 “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

07 May 2024

Date of mailing of the international search report

07 May 2024

Name and mailing address of the ISA/CN

China National Intellectual Property Administration (ISA/
CN)
China No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao, Haidian District,
Beijing 100088

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/CN2023/141322

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2006190234 A (WASEDA UNIVERSITY) 20 July 2006 (2006-07-20) entire document	1-9
A	JP 2006172406 A (ADVANCE SOFT KK) 29 June 2006 (2006-06-29) entire document	1-9

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/CN2023/141322

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
CN	116818610	A	29 September 2023	None	
CN	116434882	A	14 July 2023	None	
CN	114910540	A	16 August 2022	None	
CN	115440319	A	06 December 2022	None	
JP	2006190234	A	20 July 2006	None	
JP	2006172406	A	29 June 2006	None	

A. 主题的分类

G01N 13/00(2006.01)i; G06F30/20(2020.01)i; G06F17/10(2006.01)i; G06F119/08(2020.01)i

按照国际专利分类(IPC)或者同时按照国家分类和IPC两种分类

B. 检索领域

检索的最低限度文献(标明分类系统和分类号)

IPC:G01N 13、G06F、G16C

包含在检索领域中的除最低限度文献以外的检索文献

C. 相关文件

类 型*	引用文件, 必要时, 指明相关段落	相关的权利要求
PX	CN 116818610 A (中国科学院深圳先进技术研究院) 2023年9月29日 (2023 - 09 - 29) 权利要求1-9	1-9
X	CN 116434882 A (华南理工大学) 2023年7月14日 (2023 - 07 - 14) 说明书第7-46段及图2	1、7-9
A	CN 114910540 A (中国科学院深圳先进技术研究院) 2022年8月16日 (2022 - 08 - 16) 全文	1-9
A	CN 115440319 A (电子科技大学长三角研究院 (湖州)) 2022年12月6日 (2022 - 12 - 06) 全文	1-9
A	JP 2006190234 A (UNIV WASEDA) 2006年7月20日 (2006 - 07 - 20) 全文	1-9

☒ 其余文件在C栏的续页中列出。

☒ 见同族专利附件。

★ 引用文件的具体类型:

“A” 认为不特别相关的表示了现有技术一般状态的文件

“D” 申请人在国际申请中引证的文件

“E” 在国际申请日的当天或之后公布的在先申请或专利

“L” 可能对优先权要求构成怀疑的文件, 或为确定另一篇引用文件的公布日而引用的或者因其他特殊理由而引用的文件 (如具体说明的)

“O” 涉及口头公开、使用、展览或其他方式公开的文件

“p” 公布日先于国际申请日但迟于所要求的优先权日的文件

“T” 在申请日或优先权日之后公布, 与申请不相抵触, 但为了理解发明之理论或原理的在后文件

“X” 特别相关的文件, 单独考虑该文件, 认定要求保护的发明不是新颖的或不具有创造性

“Y” 特别相关的文件, 当该文件与另一篇或者多篇该类文件结合并且这种结合对于本领域技术人员为显而易见时, 要求保护的发明不具有创造性

“&” 同族专利的文件

国际检索实际完成的日期

2024年5月7日

国际检索报告邮寄日期

2024年5月7日

ISA/CN的名称和邮寄地址

中国国家知识产权局
中国北京市海淀区蓟门桥西土城路6号 100088

授权官员

冯志华

电话号码 (+86) 010-62085658

PCT/ISA/210 表(第2页) (2022年7月)

C. 相关文件		
类 型*	引用文件，必要时，指明相关段落	相关的权利要求
A	JP 2006172406 A (ADVANCE SOFT KK) 2006年6月29日 (2006 - 06 - 29) 全文	1-9

国际申请号
PCT/CN2023/141322

检索报告引用的专利文件			公布日 (年/月/日)	同族专利	公布日 (年/月/日)
CN	116818610	A	2023年9月29日	无	
CN	116434882	A	2023年7月14日	无	
CN	114910540	A	2022年8月16日	无	
CN	115440319	A	2022年12月6日	无	
JP	2006190234	A	2006年7月20日	无	
JP	2006172406	A	2006年6月29日	无	