

Document & Guideline cho Notebook AS_ALD_Sim - V3.ipynb

1. Giới thiệu

Notebook này được xây dựng để mô phỏng quá trình Atomic Layer Deposition (ALD) – một kỹ thuật phủ màng mỏng từng lớp nguyên tử. Mô hình này cho phép:

- Tạo bề mặt substrate từ file CIF.
- Định nghĩa các phân tử precursor/inhibitor.
- Chạy mô phỏng hấp phụ, xác định vị trí liên kết tiềm năng.
- Phân tích kết quả để hiểu cơ chế ALD.

Mục tiêu: Giúp sinh viên hiểu cách dùng ASE (Atomic Simulation Environment) để mô phỏng tương tác cơ bản trên bề mặt vật liệu.

2. Yêu cầu hệ thống

- Python ≥ 3.8
- Thư viện cần cài đặt:
`pip install ase numpy scipy`
- Công cụ xem cấu trúc nguyên tử (tùy chọn):
`pip install ase[gui]`

3. Cấu trúc Notebook

Notebook bao gồm các phần chính:

- a) Import Libraries – nạp thư viện ASE, numpy, scipy.
- b) Supporting Functions – định nghĩa các hàm phụ trợ để xử lý dữ liệu.
- c) Precursor/Inhibitor Configuration – đọc file cấu trúc phân tử.
- d) Substrate Surface Configuration – tạo slab từ file CIF.
- e) Run Simulation – chạy mô phỏng hấp phụ ALD.

4. Hướng dẫn sử dụng

Bước 1: Chuẩn bị dữ liệu – file CIF cho substrate, file XYZ/CIF cho precursor (có thể dùng định dạng khác, đã thử với file SDF).

Bước 2: Tạo bề mặt slab bằng hàm `generate_slab_from_cif`.

Bước 3: Khởi tạo precursor bằng atomic_positions.

Bước 4: Chạy mô phỏng với tham số N, N_gas.

5. Giải thích kết quả

Output chính của mô phỏng:

- Tọa độ nguyên tử sau hấp phụ.
- Số lượng site hấp phụ thành công.
- Hình ảnh mô phỏng trực quan.

Ý nghĩa: cho thấy cách các phân tử precursor bám lên bề mặt và ảnh hưởng của inhibitor.

6. Cách tùy chỉnh

- N: số cycle ALD.
- N_gas: số phân tử mỗi vòng.
- MAX_SITES: số site hấp phụ tối đa.
- miller_indices: mặt tinh thể substrate.
- layers: số lớp atom trong slab.
- vacuum: khoảng chân không.

7. Lỗi thường gặp & xử lý

- ✗ File không mở được → Kiểm tra định dạng file .cif, .xyz.
- ✗ ASE không tìm thấy → Cài lại ASE: pip install ase.
- ✗ Kết quả trống → Có thể do bề mặt không có site phù hợp, thử tăng MAX_SITES.