# ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Y I K 620.186 + 620.187 + 539.27

# КОМПЛЕКС АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ДИФРАКЦИОННОГО КАРТИРОВАНИЯ ДЛЯ ПРОСВЕЧИВАЮЩЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

© 2023 г. И. А. Каратеев<sup>1,\*</sup>, А. В. Овчаров<sup>1</sup>, К. Г. Каратеева<sup>1</sup>, Н. Н. Преснякова<sup>1</sup>, Р. А. Камышинский<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия <sup>2</sup>Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва, Россия \*E-mail: iakarateev@gmail.com

Поступила в редакцию 27.07.2022 г. После доработки 26.08.2022 г. Принята к публикации 30.08.2022 г.

Представлены результаты разработки программного комплекса для автоматизированного ориентационного картирования на основе дифракционных данных. Экспериментальный модуль комплекса отвечает за взаимодействие с микроскопом и получение дифракционных карт. Аналитический модуль в автоматическом режиме проводит обработку и расшифровку дифракционных картин, полученных с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Анализ тестовых данных показал, что результаты расшифровки находятся в соответствии с модельными данными.

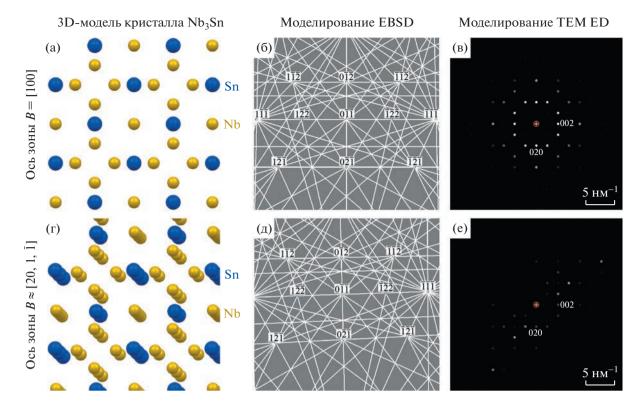
**DOI:** 10.31857/S0023476123010113, **EDN:** DOOODF

#### **ВВЕДЕНИЕ**

Современные задачи материаловедения, в частности исследования микроструктуры облученных, полупроводниковых и композитных материалов, требуют от электронной микроскопии не только высокого пространственного разрешения и широкого спектра аналитических возможностей, но и количественного анализа для статистической достоверности получаемых результатов [1, 2], что, в свою очередь, приводит к необходимости обработки большого объема данных [3].

Одним из методов получения статистически достоверных данных о кристаллографических фазах и их взаимных ориентациях в образце является метод дифракционного картирования. Особо широкое распространение метод получил в растровой электронной микроскопии (РЭМ), где для картирования используется дифракция отраженных электронов (ДОЭ) [4, 5]. Однако дифракционное картирование в РЭМ обладает несколькими существенными недостатками, в частности необходима прецизионная подготовка поверхности образца [6], которая во избежание затемнения детектора должна иметь минимальную шероховатость и при этом быть неповрежденной для максимизации сигнала ДОЭ, формирующегося в поверхностном слое материала ( $\sim 50$  нм) [7-9]. Вместе с тем картины ДОЭ обладают малым соотношением сигнал/шум [10], поскольку дифрагированные электроны составляют лишь малую часть от всех электронов [10], вылетающих из образца. Частично эта проблема решается увеличением тока пучка или времени экспозиции [10], однако чувствительные образцы могут повреждаться высокоинтенсивным электронным пучком [11], что ограничивает применимость такого подхода. Также отметим, что с уменьшением размера зерен в материале качество картин ДОЭ существенно снижается, поэтому обычно ДОЭ не применяется для исследования материалов с размером зерен менее 100 нм [12].

По сравнению с картированием в РЭМ дифракционное картирование с использованием просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) имеет ряд существенных преимуществ. Так, практически с любого образца, приготовленного для ПЭМ, можно получить дифракционные данные даже в тех случаях, когда прямое наблюдение кристаллической решетки невозможно (например, на толстых участках образца). Данные электронной дифракции, получаемые в ПЭМ, обладают более высоким соотношением сигнал/шум по сравнению с ДОЭ. Это позволяет минимизировать ток пучка и время экспозиции [13], что делает возможным проведение исследований чувствительных образцов [14]. Использование ПЭМ в режиме нанопробы пучка (TEM-nanoprobe) или просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ) в режиме микропробы пучка



**Рис. 1.** Эволюция дифракционной картины для ДОЭ и ПЭМ при повороте кристалла: a, r — трехмерная модель кристалла  $Nb_3Sn$ ; 6, д — ДОЭ-дифрактограммы, g, g — ПЭМ-дифрактограммы, соответствующие кристаллу в приведенных ориентациях.

(µProbe-STEM) позволяет получать дифракционные картины от областей размером менее 2 нм [15].

Однако, несмотря на более высокое пространственное разрешение и лучшее качество экспериментальных данных, метод дифракционного картирования в ПЭМ не получил широкого распространения. Это связано с тем, что, во-первых, лишь небольшая часть дифракционных картин, соответствующая низкоиндексным осям зон, подходит для расшифровки без использования специализированного программного обеспечения ( $\Pi O$ ). На рис. 1 на примере кристалла Nb<sub>3</sub>Sn  $(Pm\overline{3}n, a = 5.29 \text{ Å})$  показано изменение дифракционных картин для ДОЭ и ПЭМ при повороте кристалла на ~7°. Как видно, ДОЭ-дифракционная картина остается узнаваемой и меняется незначительно в отличие от дифракционной картины в ПЭМ.

Во-вторых, в электронную дифракцию делают существенный вклад динамические эффекты [16], что отличает ее от рентгеновской. В частности, динамические эффекты проявляются в том, что интенсивность дифракционных пиков зависит от толщины образца [16], а поскольку специфика подготовки образцов для ПЭМ-исследований часто приводит к неравномерной толщине образца,

расшифровка картин электронной дифракции существенно усложняется.

Для подавления динамических эффектов был разработан метод прецессии электронного пучка [17]. Он заключается в следующем: электронный пучок, освещающий образец, отклоняется от оптической оси на некоторый угол, одновременно с этим смещение нулевого дифракционного пика компенсируется сдвигом всей дифракционной картины. На такой дифракционной картине также присутствуют динамические эффекты, однако, если начать вращать отклоненный электронный пучок вокруг оптической оси (прецессия электронного пучка), то данные эффекты будут усредняться, что приведет к их подавлению. В большинстве случаев для существенного подавления динамических эффектов достаточно угла прецессии  $1^{\circ}-2^{\circ}$  [18].

Таким образом, основными препятствиями для повсеместного внедрения метода дифракционного картирования в ПЭМ являются сложность идентификации дифракционных картин для кристаллов произвольной ориентации и наличие динамических эффектов. Разработка программного комплекса для автоматизированного ориентационного картирования на основе дифракционных данных, включающего в себя аналитический и экспериментальный модули, позволит автомати-



Рис. 2. Интерфейс экспериментального модуля, подписаны ключевые блоки интерфейса.

зировать получение и расшифровку дифракционных картин полифазных систем, одновременно снизив предел минимального размера исследуемого объекта до 10 нм (против эффективного предела ДОЭ в  $\sim 100$  нм).

## ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДИФРАКЦИОННОГО КАРТИРОВАНИЯ

Разработанный программный комплекс состоит из двух независимых частей: экспериментального и аналитического модулей.

Экспериментальный модуль обеспечивает взаимодействие с ПО микроскопа и дает возможность проводить эксперименты по дифракционному картированию. Применение отдельной программы позволяет использовать дифракционное картирование в различных режимах работы микроскопа (сейчас доступно картирование только в режиме ПРЭМ) без ограничений, накладываемых форматом файлов, используемых для сохранения данных, а также реализует прецессию электронного пучка для подавления динамических эффектов на картинах электронной дифракции.

Аналитический модуль выполняет автоматизированную обработку и расшифровку экспериментальных данных. По мере расшифровки дифракционной карты информация о фазах и ориентациях кристаллов для каждой точки карты записывается в файл для дальнейшей обработки.

#### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ МОДУЛЬ

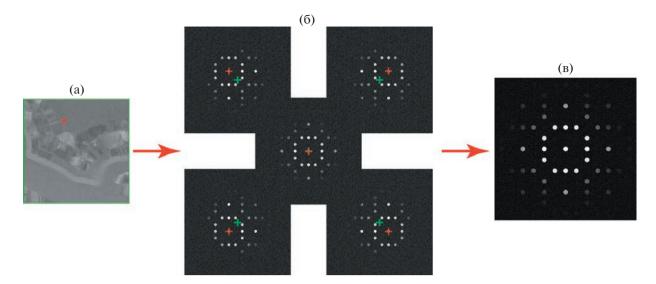
Экспериментальный модуль призван решить целый ряд задач. С одной стороны, он устраняет ограничения, накладываемые стандартным ПО микроскопа на проведение экспериментов по дифракционному картированию (например, на некоторых микроскопах невозможно снять дифрак-

ционные карты размером более  $100 \times 100$  точек). С другой стороны, экспериментальный модуль реализует ряд методик, улучшающих качество экспериментальных данных, таких как прецессия электронного пучка, подавляющая динамические эффекты на картинах электронной дифракции, и последовательная съемка нескольких дифракционных картин от одной области с их последующим усреднением с целью повышения соотношения сигнал/шум. Интерфейс разработанного экспериментального модуля приведен на рис. 2.

Экспериментальный модуль подразумевает взаимодействие с микроскопом, однако разработка стороннего ПО непосредственно на управляющем компьютере микроскопа практически невозможна. Поэтому на компьютеры разработчиков устанавливали комплект ПО микроскопа в режиме моделирования.

На первом этапе был разработан прототип ПО. который устанавливал связь с микроскопом, получал от него экспериментальные параметры, а также ПЭМ/ПРЭМ-изображения. При реализации прецессии электронного пучка был обнаружен ряд существенных ограничений на программное взаимодействие с микроскопом (ТЕМ-Scripting), наложенных производителем ПО и делающих реализацию "чистой" прецессии практически невозможной. TEMScripting представляет собой последовательный набор команд без возможности их параллельного выполнения. Это деневозможным получение изображения одновременно с прецессией электронного пучка. Данное ограничение удалось обойти благодаря возможностям ПО ESVison (TIA), которое предоставляет доступ к получению изображений и при этом не зависит от TEMScripting.

Более существенным ограничением оказалась задержка передачи команд TEMScripting на ре-



**Рис. 3.** Схема получения конечной дифрактограммы в режиме псевдопрецессии: a — область картирования с обозначенной текущей позицией; б — для каждой точки снимается набор дифракционных картин с различными углами наклона; b — для получения финального изображения дифракционные картины выравниваются друг относительно друга и складываются.

альный микроскоп. При использовании ПО микроскопа в режиме моделирования задержка при передаче команды составляет ~1 мс, что позволяет за время экспозиции дифракционной картины (~40 мс) осуществить наклон пучка около 40 раз, существенно подавляя динамические эффекты. Однако тесты на реальном оборудовании показали, что задержка при передаче команды ТЕМ-Scripting микроскопу составляет 20-30 мс, делая реализацию прецессии электронного пучка невозможной – время экспозиции становится сравнимо со временем наклона пучка. При изучении альтернативных вариантов установлено, что панели управления микроскопом позволяют наклонять пучок/сдвигать дифракционную картину практически без задержек. Таким образом, моделирование панелей микроскопа является одной из возможностей реализации программной прецессии электронного пучка, однако данный способ очень сложен.

Учитывая описанные выше ограничения, было принято решение реализовать псевдопрецессию электронного пучка. В экспериментальном модуле при выполнении дифракционного картирования пользователь может применять опции усреднения нескольких дифракционных картин, а также дополнительно активировать прецессию и задавать ее угол. Тогда для каждой точки дифракционной карты будет снят набор дифракционных картин с различным наклоном пучка. Затем с помощью взаимной корреляции происходит определение сдвигов дифракционных картин друг относительно друга, их выравнивание с последующим суммированием и получение конечного изображения (рис. 3).

Финальный алгоритм работы пользователя выглядит следующим образом:

- микроскоп переводится в необходимый режим работы (на данный момент поддерживается работа в ПРЭМ в режиме микропробы µProbeSTEM);
  - проводится съемка области образца;
- выбирается область картирования и подбираются условия съемки (время экспозиции, количество дифрактограмм, использование прецессии);
- выбирается файл для сохранения карты и проводится запуск эксперимента.

Перед началом эксперимента пользователь указывает выходной формат дифракционной карты. В зависимости от выбранного формата в файл будут записываться либо непосредственно дифракционные картины (.ser), либо только информация об обнаруженных дифракционных пиках (.cdm) [19]. Для этого дифракционные картины подвергаются обработке: проводится детектирование дифракционных пиков, вычисление их положения и интенсивности. Последний вариант записи данных позволяет существенно уменьшить занимаемый дифракционной картой объем.

### АНАЛИТИЧЕСКИЙ МОДУЛЬ

На рис. 4 представлена схема программной архитектуры разработанного аналитического модуля, который состоит из различных подмодулей (далее для упрощения — модулей). Модульная архитектура обеспечивает большую гибкость программы — новые возможности могут быть относительно легко добавлены в существующее ПО.

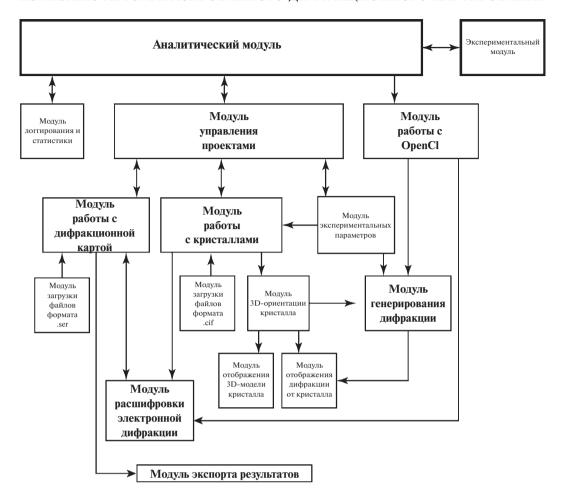


Рис. 4. Схема программной архитектуры аналитического модуля.

Задачи, выполняемые отдельными модулями, показаны далее в рамках описания работы с аналитическим модулем.

Работа с программой начинается с создания проекта — набора файлов, содержащих настройки, в которых сохраняется актуальное состояние проекта: пути к различным файлам — дифракционной карте и файлам с кристаллографической информацией, экспериментальные параметры, текущее состояние расшифровки и т.д. За сохранение, загрузку и поддержание этих параметров в актуальном состоянии отвечает модуль управления проектами.

Затем пользователю необходимо задать экспериментальные параметры, влияющие на моделирование дифракционных картин, такие как ускоряющее напряжение, толщина образца, размер области генерирования дифракции (аналог длины камеры), разрешение моделируемой дифрактограммы и др. Благодаря модулю экспериментальных параметров при изменении любого из описанных выше параметров происходит автоматическое обновление моделируемой дифракционной картины.

На следующем этапе с помощью модуля работы с кристаллами [20] пользователь загружает в программу файлы с кристаллографической информацией (на данный момент поддерживаются файлы формата. cif), содержащие фазы, которые, предположительно, находятся в исследуемом образце. Пользователь может изучить параметры и трехмерную структуру загруженных кристаллографических фаз с помощью модуля трехмерной ориентации кристалла [21]. Модуль позволяет настроить параметры отображения модели: количество элементарных ячеек, радиус и цвет отображаемых атомов. Также модуль обеспечивает возможность взаимодействия пользователя с трехмерной моделью кристалла, позволяя задавать его предпочтительную ориентацию. Данные об ориентации кристалла передаются в модуль генерирования дифракции [22], что позволяет одновременно демонстрировать пользователю не только трехмерную модель кристалла, но и соответствующую смоделированную дифракционную картину (рис. 5).

Далее необходимо добавить в программу дифракционную карту. Поскольку дифракционные

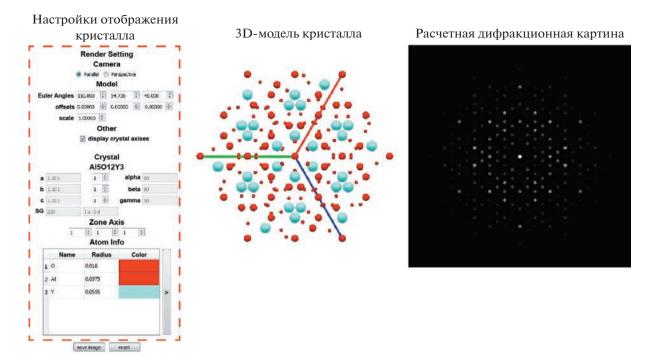


Рис. 5. Пользовательский интерфейс аналитического модуля, вкладка просмотра параметров кристалла.

карты могут содержать тысячи (или даже десятки тысяч) дифракционных картин и занимать десятки гигабайт дискового пространства, то загружать их в программу целиком нецелесообразно. *Модуль работы с дифракционной картой* [23, 24] обеспечивает загрузку дифракционных картин по требованию, оптимизируя использование ресурсов оперативной памяти.

На следующем шаге пользователь указывает файл, в который должны сохраняться результаты расшифровки дифракционной карты, и запускает процесс расшифровки. Непосредственно перед расшифровкой аналитический модуль выполняет несколько вспомогательных задач. Вопервых, блокируются изменения критичных параметров, таких как условия эксперимента, список файлов с кристаллографической информацией и дифракционная карта. Во-вторых, для каждой кристаллографической фазы проводится моделирование всех возможных дифракционных картин (в кинематическом приближении) с определенным угловым разрешением (1°-2°) и их численное описание – для каждого дифракционного пика определяются положение и интенсивность. Среди всех дифракционных пиков выбирается набор самых интенсивных, которые будут характеризовать дифракционную картину для данной ориентации кристалла.

Далее начинается непосредственно процесс расшифровки [25]: из загруженной дифракционной карты считывается первая дифракционная картина и передается в модуль расшифровки элек-

тронной дифракции. В этом модуле экспериментальная дифракционная картина подвергается обработке и анализу, в результате которых определяются положение и интенсивность дифракционных пиков, обнаруженных на изображении [26]. Затем набор наиболее интенсивных пиков на экспериментальной дифракционной картине сравнивается с пиками смоделированных картин для каждой фазы и ориентации. Результатом сравнения интенсивностей пиков и их положения является число, характеризующее схожесть дифракционных картин. Дифракционная картина, показывающая наилучшую схожесть, полагается результатом расшифровки данной точки. Описанная выше процедура занимает значительное время: несмотря на то что сравнение экспериментальной и смоделированной дифрактограмм проводится быстро (порядка 20 мкс), количество необходимых сравнений очень велико и составляет  $\sim$ 20 000 000 для каждой фазы при шаге моделирования в 1°. Простая оценка показывает, что для сравнения одной экспериментальной дифрактограммы со всеми модельными дифрактограммами от одной фазы потребуется более 10 мин. Соответственно, для расшифровки карты размером  $100 \times 100$  точек потребуется около 10 нед непрерывных вычислений.

Однако задача сравнения дифракционных картин может быть оптимизирована с использованием параллельных вычислений, так как сравнение дифракционных картин проводится независимо. Параллельные вычисления обеспечива-

ются с помощью *модуля работы с OpenCL*. OpenCL – открытая библиотека, обеспечивающая поддержку параллельных вычислений на центральных (ЦП) и графических процессорах  $(\Gamma\Pi)$ . Модуль работы с OpenCL определяет доступные на компьютере пользователя вычислительные устройства (ЦП и ГП), проводит инициализацию OpenCL и определяет оптимальные параметры для всех этапов вычислений, основываясь на производительности устройств. Перенос процедуры расшифровки на ГП (NVIDIA Ge-Force GTX 980) позволил сократить время, необходимое для расшифровки одной точки дифракционной карты, до 1 с на фазу. Достигнутая скорость работы является приемлемой, но все еще может быть повышена путем оптимизации алгоритмов сравнения и использования более современных ГП.

Полученные результаты расшифровки передаются в модуль экспорта результатов, обеспечивающий сохранение результатов в файл в корректном формате, после чего процесс расшифровки переходит к следующей точке. На рис. 6 приведена упрошенная схема рабочего процесса.

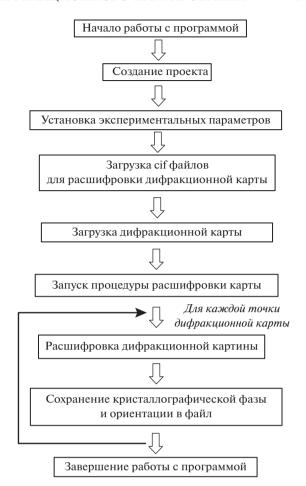
#### РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ ПРОГРАММЫ

Для проверки результатов расшифровки необходимо сравнить результаты работы аналитического модуля с реальной фазой и ориентацией картируемых кристаллов. Основными способами такого сравнения являются ручная расшифровка дифракционной карты от реального образца (крайне трудоемкая процедура), либо искусственное моделирование дифракционной карты, при которой фаза и ориентация кристаллов заранее известны.

Для оценки качества расшифровки данных аналитическим модулем и оптимизации скорости его работы была разработана дополнительная программа, позволяющая проводить имитационные эксперименты по дифракционному картированию. Ее интерфейс представлен на рис. 7.

Программа проведения имитационных экспериментов позволяет пользователю самостоятельно создать набор зерен, каждое из которых может иметь свою фазу и ориентацию, задать параметры проведения эксперимента и размер дифракционной карты. Результатом работы программы являются два файла — дифракционная карта и файл, содержащий информацию о реальных фазах и ориентациях зерен для каждой точки карты. Таким образом, может быть выполнена проверка результатов расшифровки дифракционной карты.

В качестве первого тестового объекта выбрана однофазная система, состоящая из зерен кремния (Si,  $Fd\overline{3}m$ , a = 5.43 Å) в различной ориентации. Исследуемая система представлена на рис. 8а.



**Рис. 6.** Упрощенная схема работы аналитического комплекса.

Зерна кремния обозначены различными цветами, квадрат соответствует области дифракционного картирования. Затем сгенерированная дифракционная карта расшифровывалась аналитическим модулем. Для проверки результатов расшифровки по данным, полученным в результате работы аналитического модуля, и модельным данным были построены обратные полюсные фигуры (рис. 8б, 8в). Видно, что результаты расшифровки дифракционной карты хорошо согласуются с заданной ориентацией зерен. Наиболее хорошо совпадают данные вблизи низкоиндексных осей зон, так как они содержат большое количество высокоинтенсивных дифракционных пиков, которые программа использует для расшифровки. Вдали от низкоиндексных осей зон количество дифракционных пиков, участвующих в анализе, мало, что приводит к ухудшению качества расшифровки, однако ее результаты по-прежнему остаются близкими к реальным данным.

В качестве второго модельного объекта выбрана полифазная система, содержащая фазы  $\alpha$ -Fe ( $Im\overline{3}m$ , a = 2.87 Å),  $\gamma$ -Fe ( $Fm\overline{3}m$ , a = 3.65 Å) и це-

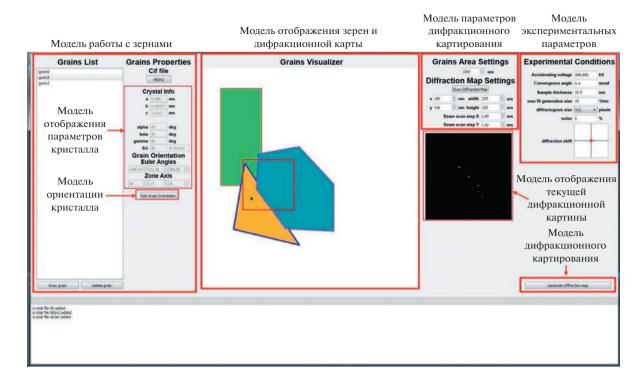
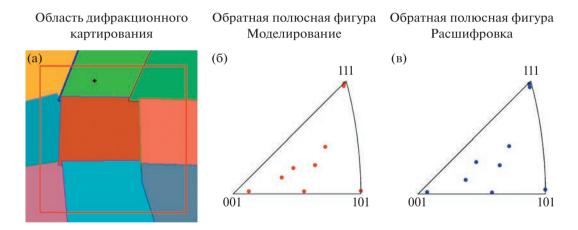


Рис. 7. Интерфейс программы проведения имитационных экспериментов.

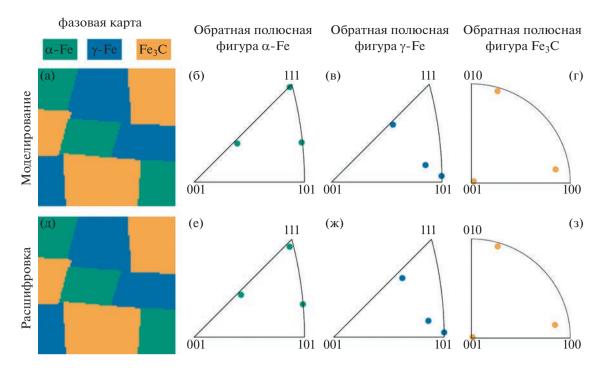


**Рис. 8.** Смоделированная однофазная система, состоящая из зерен кремния в различных ориентациях (а); обратная полюсная фигура с результатами модельных данных (реальная ориентация зерен) (б); обратная полюсная фигура с результатами проведенной расшифровки (в).

ментит  $Fe_3C$  (*Pbnm*, a=4.52, b=5.08, c=6.73 Å). На рис. 9a-9г приведены фазовая карта и обратные полюсные фигуры для каждой из фаз, построенные по модельным данным. Аналогичные карта и обратные полюсные фигуры построены по результатам расшифровки (рис. 9д-93). На фазовой карте отчетливо видно, что все три фазы хорошо разделяются аналитическим комплексом. Обратные полюсные фигуры, построенные по расшифрованным данным, также близки к модельным.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлены результаты разработки программного комплекса дифракционного картирования в ПЭМ. Экспериментальный модуль отвечает за взаимодействие с микроскопом и позволяет получать дифракционные карты произвольных размеров, а также предоставляет возможности по улучшению качества дифракционных картин с помощью усреднения и псевдопрецессии электронного пучка. Аналитический модуль позволяет определять фазу и ориентацию



**Рис. 9.** Смоделированная полифазная система, содержащая фазы  $\alpha$ - и  $\gamma$ -железа и цементит (Fe<sub>3</sub>C): фазовая карта и обратные полюсные фигуры для каждой из фаз, построенные по модельным данным (a—r) и по результатам расшифровки (д—з).

кристаллов в каждой точке дифракционной карты в автоматическом режиме. На текущий момент скорость расшифровки для однофазной системы составляет около 1 с на точку и еще может быть оптимизирована. Тестирование на модельных системах показывает, что результаты расшифровки аналитическим модулем находятся в соответствии с модельными данными, однако вдали от низкоиндексных осей зон точность снижается. Повысить точность расшифровки высокоиндексных осей зон можно с помощью использования более совершенных алгоритмов.

В качестве дальнейшего развития комплекса рассматривается полная интеграция экспериментального и аналитического модулей, что позволит расшифровывать дифракционные карты непосредственно во время проведения эксперимента.

Работа выполнена в рамках госзадания НИЦ "Курчатовский институт".

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Dethloff C., Gaganidze E., Aktaa J.* // J. Nucl. Mater. 2014. V. 454. № 1–3. P. 323. https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.07.078
- 2. *Ho H., Zhu J., Kulovits A. et al.* // J. Appl. Phys. 2014. V. 116. № 19. P. 193510. https://doi.org/10.1063/1.4902082
- Jesse S., Chi M., Belianinov A. et al. // Sci. Rep. 2016.
  V. 6. P. 26348. https://doi.org/10.1038/srep26348

- Adams B.L., Dingley D.J., Kunze K., Wright S.I. // Mater. Sci. Forum. 1994. V. 157–162. P. 31. https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/msf.157-162.31
- Baek M.-S., Kim K.-S., Park T.-W. et al. // Mater. Sci. Eng. A. 2020. V. 785. P. 139375. https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.139375
- 6. *Nowell M.M.*, *Witt R.A.*, *True B.* // Microsc. Microanal. 2005. V. 11. № S02. P. 504. https://doi.org/10.1017/s143192760550672x
- 7. *Dingley D.J.* // J. Microsc. 2004. V. 213. P. 214. https://doi.org/10.1111/j.0022-2720.2004.01321.x
- 8. Bhattacharyya A., Eades J.A. // Scanning. 2009. V. 31. P. 114. https://doi.org/10.1002/sca.20150
- 9. Wisniewski W., Rüssel C. // Scanning. 2016. V. 38. № 2. P. 164. https://doi.org/10.1002/sca.21251
- 10. *Nolze G., Hielscher R., Winkelmann A.* // Cryst. Res. Technol. 2017. V. 52. № 1. P. 1600252. https://doi.org/10.1002/crat.201600252
- Sun H., Adhyaksa G.W.P., Garnett E.C. // Adv. Energy Mater. 2020. V. 10. P. 2000364. https://doi.org/10.1002/aenm.202000364
- 12. *Humphreys F.J.* // Scr. Mater. 2004. V. 51. № 8. P. 771. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2004.05.016
- Migunov V., Ryll H., Zhuge X. et al. // Sci. Rep. 2015.
  V. 5. P. 14516. https://doi.org/10.1038/srep14516
- Kodjikian S., Klein H. // Ultramicroscopy. 2019. V. 200.
  P. 12.
  https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2019.02.010

- Ward M.R., Boyes E.D., Gai P.L. // J. Phys. Conf. Ser. 2014. V. 522. P. 012068. https://doi.org/10.1088/1742-6596/522/1/012068
- Williams D.B., Carter C.B. Transmission electron microscopy. 2nd ed. Boston, MA: Springer US, 2009. 775 p. https://doi.org/10.1007/978-0-387-76501-3
- 17. *Avilov A., Kuligin K., Nicolopoulos S. et al.* // Ultramicroscopy. 2007. V. 107. № 6—7. P. 431. https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2006.09.006
- 18. *Ciston J.*, *Deng B. Marks L.D. et al.* // Ultramicroscopy. 2008. V. 108. № 6. P. 514. https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2007.08.004
- 19. *Каратеев И.А.* Программа для ЭВМ "Программный модуль чтения и записи дифракционных карт формата cdm": А.с. 2022611590. Правообладатель ФГБУ НИЦ "Курчатовский институт". № 2022610617; заявл. 19.01.2022; опубл. 27.01.2022, бюл. № 2. 0.035 Мб.
- 20. *Каратеев И.А.* программа для ЭВМ "Программа межмодульного трансфера кристаллографической информации формата .cif": А. с. 2019664803. Правообладатель ФГБУ НИЦ "Курчатовский институт". № 2019663532; заявл. 29.10.2019; опубл. 13.11.2019, бюл. № 11. 0.018 Мб.
- Каратеев И.А. Программа для ЭВМ "Модуль визуализации трехмерной структуры кристалла": А. с. 2020613147. Правообладатель ФГБУ НИЦ "Курча-

- товский институт". № 2020612059; заявл. 27.02.2020; опубл. 11.03.2020, бюл. № 3. 0.035 Мб.
- 22. *Каратеев И.А.* Программа для ЭВМ "Программный модуль расчета картин электронной дифракции в кинематическом приближении": А. с. 2021611215. Правообладатель ФГБУ НИЦ "Курчатовский институт". № 2020668052; заявл. 30.12.2020; опубл. 25.01.2021, бюл. № 2.0.029 Мб.
- 23. *Каратеев И.А.* Программа для ЭВМ "Программный модуль считывания и записи файлов формата ser": A. c. 2021611214. Правообладатель ФГБУ НИЦ "Курчатовский институт". № 2020668050; заявл. 30.12.2020; опубл. 25.01.2021, бюл. № 2. 0.066 Мб.
- 24. *Каратеев И.А.* Программа для ЭВМ "Программный модуль считывания и визуализации дифракционных карт": А. с. 2021611216. Правообладатель ФГБУ НИЦ "Курчатовский институт". № 2020668048; заявл. 30.12.2020; опубл. 25.01.2021, бюл. № 2. 0.032 Мб.
- 25. *Каратеев И.А.* Программа для ЭВМ "Программный модуль расшифровки дифракционных карт": А. с. 2022611673. Правообладатель ФГБУ НИЦ "Курчатовский институт". № 2022610586; заявл. 19.01.2022; опубл. 31.01.2022, бюл. № 2. 0.041 Мб.
- 26. *Каратеев И.А.* Программа для ЭВМ "Программный модуль поиска и численного описания дифракционных пиков на картинах электронной дифракции": А. с. 2022611591. Правообладатель ФГБУ НИЦ "Курчатовский институт". № 2022610619; заявл. 19.01.2022; опубл. 27.01.2022, бюл. № 2. 0.052 Мб.