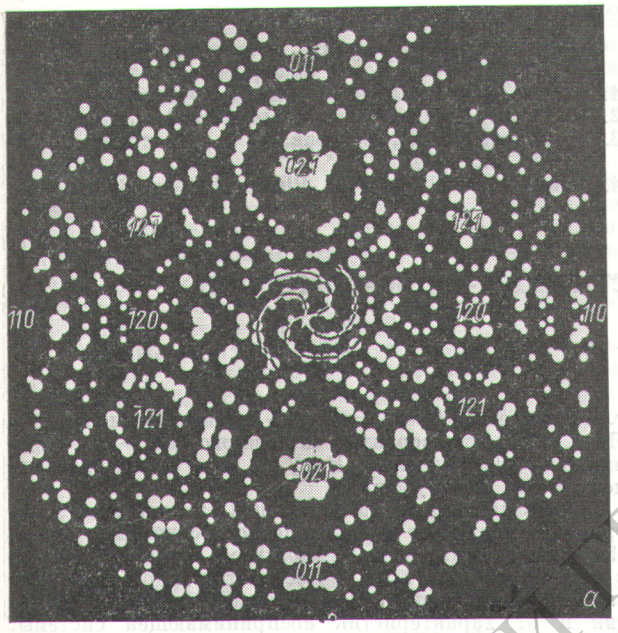
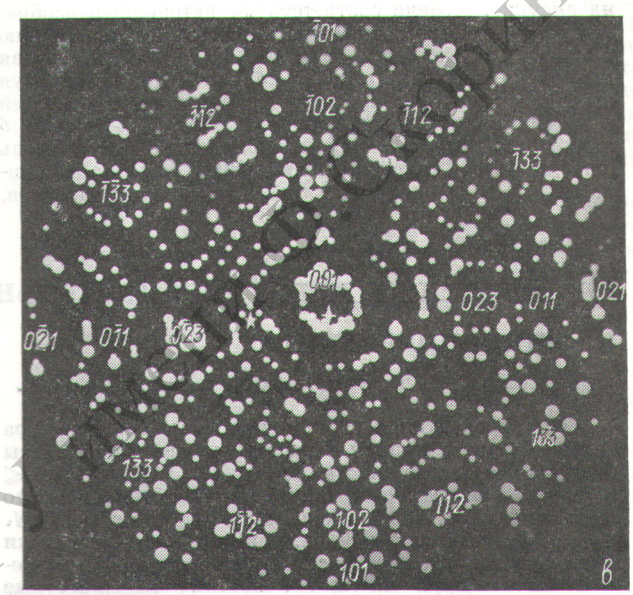
УДК 535.82:546.791

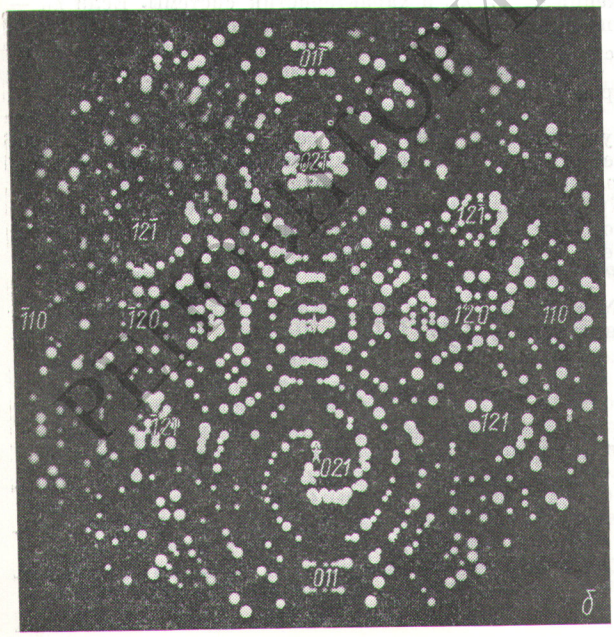
Интерпретация автоионных изображений дислокационной структуры урана с помощью ЭВМ

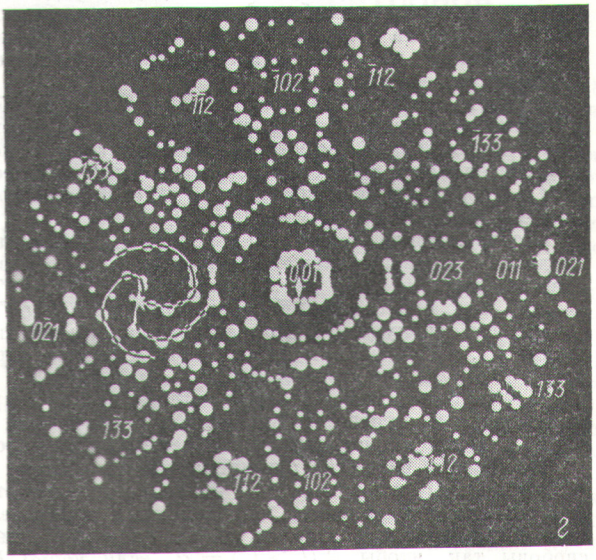
СУВОРОВ А. Л., РАЗИНКОВА Т. Л.

Для интерпретации автоионных изображений образцов из α-урана, содержащих дислокации, разработана и реализована программа моделирования соответствующего контраста изображений с помощью ЭВМ. Программа учитывает анизотропию упругих свойств материала; расчет атомных смещений в поле дислокации









Рассчитанные на ЭВМ модели автоионных изображений урановых образцов, ориентированных вдоль [010] (*а*, *б*) и [001] (*в*, *г*). Место выхода линии дислокации ($b = b_0$ [010] для *а*, *б*; $b = c_0$ [001] для *в*, *г*) на поверхность образца отмечено звездой

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скорины

проведен согласно [1]. В основу моделирования положен метод тонкой оболочки [2]. Локальная яркость отображения отдельных атомов учтена по ранее предложенному методу [3].

Расчеты проводились для двух возможных ориентировок урана: [010] и [001]. Радиус острия образца был равен ~ 110 Å, толщина отображаемого приповерхностного слоя 0,4 Å. Попутно были рассчитаны некоторые параметры атомного окружения: максимальное число соседей i-го порядка, векторы трансляции к соответствующим соседним атомам, расстояние до этих атомов.

Примеры рассчитанных моделей приведены на рисунке. Модели соответствуют автоионным изображениям образца, содержащего винтовую дислокацию с $\mathbf{b} = b_0$ [010]; ориентировка [010]. Для модели *а* линия дислокации выходит в центр полюса (010), преобразуя отображаемые края кристаллографических плоскостей в четырехзаходную спираль ($n = 4$). Для модели *б* линия дислокации смещена параллельно [010] вдоль [001] на 10 c_0 [выход на полюс (021)]; заходность спирали $n = 2$. Модели *в*, *г* рассчитаны для образцов, ориентированных вдоль [001], содержащих дислокацию с $\mathbf{b} = c_0$ [001]. Линия дислокации смещена параллельно [001] вдоль [010] на $5b_0$ (*в*) и $10b_0$ (*г*). Интерпретация моделей неоднозначна: $n = 1$ или 2 (*в*) и $n \approx 3$ (*г*).

Проведенный в настоящей работе анализ многих моделей позволяет сделать вывод о неправомерности применения к урану ($\mathbf{g}\cdot\mathbf{b}$)-критерия [4]. Поэтому машинное моделирование автоионных изображений дислокационной структуры урана представляется единственным способом их интерпретации.

(№ 860/8468. Поступила в Редакцию 14/VIII 1975 г. Полный текст 0,8 а. л., 7 рис., 2 табл., 23 библиогр. ссылки).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Yoo M., Loh B.** «J. Appl. Phys.», 1972, v. 43, p 1373.
2. **Moore A.** «J. Phys. Chem. Solids», 1962, v. 23, p. 907.
3. **Разинкова Т. Л., Суворов А. Л.** Препринт ИТЭФ № 48, М., 1974.
4. **Ranganathan S.** «J. Appl. Phys.», 1966, v. 37, p. 4346.

УДК 53.089.52:621.384.8

Определение меры чувствительности масс-спектрометров к микропримесям

АЛЕКСАНДРОВ М. Л., КОНОВАЛОВА Н. А., ПЛИСС Н. С.

Если исследуемая с помощью масс-спектрометра проба содержит наряду с веществом некоторой массы M также вещество массы $M_1 = M + \Delta M$, $|\Delta M| \leqslant 1 \div 2$, количество которого в пробе очень мало по сравнению с M, то M_1 назовем микропримесью к M. Масса M_1 предполагается лежащей в области развертки по массам, на которую распространяется так называемый «хвост» пика массы M, поэтому надежностные и точностные качества обнаружения и оценки параметров сигнала массы M_1 должны будут определяться интенсивностью и нестабильностью как шумового сигнала «хвоста» на этой массе, так и полезного сигнала микропримеси на выходе воспринимающей системы (умножитель — усилитель).

В настоящей работе предлагается алгоритм обнаружения, основанный на теории статистических решений и дающий возможность ввести объективную меру чувствительности масс-спектрометра к микропримесям (ЧМ). Предлагаемый алгоритм учитывает нелинейность системы умножитель — усилитель.

Статистическая постановка проблемы обнаружения сводится к проверке статистической гипотезы о равенстве средних значений двух совокупностей $H_0 : EY = EX$ при односторонней альтернативе $H_1 : EY > EX$, где совокупность X определяет замеры вне пика массы M_1, а Y — замеры на нем, т. е. H_0 есть утверждение об отсутствии примеси, а H_1 — о ее наличии.

В качестве статистического критерия в работе принят известный критерий Стьюдента t с поправкой на число степеней свободы ввиду неизвестности дисперсий [1, 2]. Именно величина t вычисляется по замерам на пике массы M_1 и вне его, и ее значение сравнивается с пороговым значением t_α, определяемым распределением Стьюдента с соответствующим числом степеней свободы так, чтобы $P(t > t_\alpha) = \alpha$, если верно H_0. Если окажется $t > t_\alpha$, то принимается решение в пользу H_1. При этом для любого выбранного α (обычно $\alpha \approx 0{,}01 \div 0{,}05$) можно вычислить мощность критерия, т. е. значение $1 - \beta = P(t > t_\alpha)$ при верности M_1. Ясно, что α есть вероятность ложного, а $1 - \beta$ — правильного обнаружения. Пару $(\alpha, 1 - \beta)$ назовем надежностью обнаружения.

Пусть на вход воспринимающей системы масс-спектрометра поступает смесь полезного сигнала и шума. Их можно считать пуассоновскими потоками ионов с интенсивностью λ_c и $\lambda_ш$ соответственно. Ясно, что замеряемые выходные данные зависят как от λ_c и $\lambda_ш$, так и от характеристик воспринимающей системы. В работе исследуется зависимость надежности обнаружения от λ_c, $\lambda_ш$ и характеристик системы. Если $\lambda_п$ — интенсивность основного пика (массы M), то отношение $\lambda_c/\lambda_п$, обнаруживаемое с заданной надежностью $(\alpha, 1 - \beta)$ может быть принято за объективную меру ЧМ прибора.

Приведены примеры вычисления надежности обнаружения для некоторых соотношений $\lambda_c/\lambda_ш$ и для нескольких характеристик воспринимающей системы (разный коэффициент электронно-электронной эмиссии). Кроме того, в работе приведены построение доверительного интервала для интенсивности сигнала микропримеси, а для значений верхнего и нижнего уровней ($P_1 = 0{,}95$; $P_2 = 1 - P_1 = 0{,}05$) его явный вид.

(№ 858/8493. Статья поступила в Редакцию 6/X 1975 г., аннотация — 19/V 1976 г. Полный текст 0,45 а. л., 1 табл., 5 библиогр. ссылок.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Welch B.** «Biometrika», 1938, v. XXIX, p. 350.
2. **Welch B.** «Biometrika», 1947, v. XXXIV, p. 28.
3. **Александров М. Л., Галль Л. Н., Плисс Н. С.** ЖТФ, 1974, т. XLIV, № 6, с. 1302.
4. **Neyman J., Tokarska B.** «J. Amer. Stat. Assoc.», 1936, v. 31, p. 318.
5. **Харрис Т.** Теория ветвящихся случайных процессов. М., «Мир», 1966.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скорины