

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 681.2.08;53.086

РЕКОНСТРУКЦИЯ ТРЕХМЕРНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ
АТОМОВ В МЕТОДЕ АТОМНО-ЗОНДОВОЙ ТОМОГРАФИИ
С УЧЕТОМ ПЛОТНОСТИ МАТЕРИАЛА

© 2022 г. А. А. Лукьянчук^{a, b}, А. А. Алеев^{a, b}, А. С. Шутов^{a, b},
О. А. Разницын^{a, b}, С. Е. Кириллов^a, С. В. Рогожкин^{a, b, *}

^aНациональный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, 123182 Россия

^bНациональный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409 Россия

*E-mail: rogozhkin@itep.ru

Поступила в редакцию 05.10.2021 г.

После доработки 05.10.2021 г.

Принята к публикации 05.10.2021 г.

Данные, собранные с помощью атомно-зондового томографа, позволяют с высокой точностью восстанавливать трехмерные атомные карты химических элементов. В связи с постоянным совершенствованием установок атомно-зондовой томографии требуются новые процедуры восстановления трехмерных распределений атомов. В этой работе предлагается улучшенный подход к реконструкции данных томографического атомного зонда, который использует динамические параметры и калибровку на основе плотности материала.

Ключевые слова: атомно-зондовая томография, восстановление 3D распределений, атомные карты

DOI: 10.56304/S2079562922010250

ВВЕДЕНИЕ

Атомно-зондовая томография (АЗТ) считается одним из самых точных инструментов для анализа материалов на атомном масштабе [1–3]. В АЗТ атомы испаряются с поверхности игольчатого образца с радиусом вершины $\sim 10\text{--}100$ нм за счет сильного электрического поля (~ 10 В/нм). Образец помещается в камеру сверхвысокого вакуума ($\sim 10^{-9}$ торр) и охлаждается до криогенных температур (20–70 К). На образец подается подпортовое напряжение, а испарение атома с вершины образца инициируется лазерным или электрическим импульсом. Для поддержания скорости испарения атомов, приложенное к образцу напряжение увеличивается с ~ 1 до 15–30 кВ во время анализа АЗТ из-за увеличения кривизны вершины образца. После испарения ионизированные атомы движутся на позиционно-чувствительный детектор на основе линий задержки. Отношение массы к заряду детектированного иона определяется по времени его полета. Затем выполняется трехмерная реконструкция распределения атомов в исследуемом объеме с использованием известных алгоритмов [4, 5]. Точность восстановления данных существенно зависит от параметров калибровки АЗТ и типа алгоритма восстановления. Трехмерные координаты вычисляются по проекционному принципу. В АЗТ используются несколько

алгоритмов восстановления координат. Основное различие между ними заключается в том, как учитываются особенности изменения радиуса кончика образца или Z координаты во время АЗТ исследования [3].

В наиболее распространенном алгоритме, предложенном Басом и др. [4], предполагается, что радиус острия образца пропорционален напряжению. Этот алгоритм удобен для учета изменения формы образца и его радиуса. Однако он может быть неточен при анализе многофазного материала. Другой алгоритм, предложенный в [6, 7], подходит для постоянного изменения угла детектирования во время АЗТ исследования. Этот алгоритм хорошо подходит для восстановления распределения атомов в материалах с разными фазами. Однако он не работает, когда атомы фаз имеют значительно разные скорости испарения и скорости изменения радиуса сильно различаются в разных фазах. Другой алгоритм использует то, что изменение радиуса может быть учтено с помощью его прямых измерений на изображении образца, полученного с помощью просвечивающей электронной микроскопии [8]. Основными параметрами восстановления являются коэффициент сжатия изображения (ICF или ξ), длина пролета иона, поле испарения для конкретного материала, коэффициент поля (k_p), атомный объ-

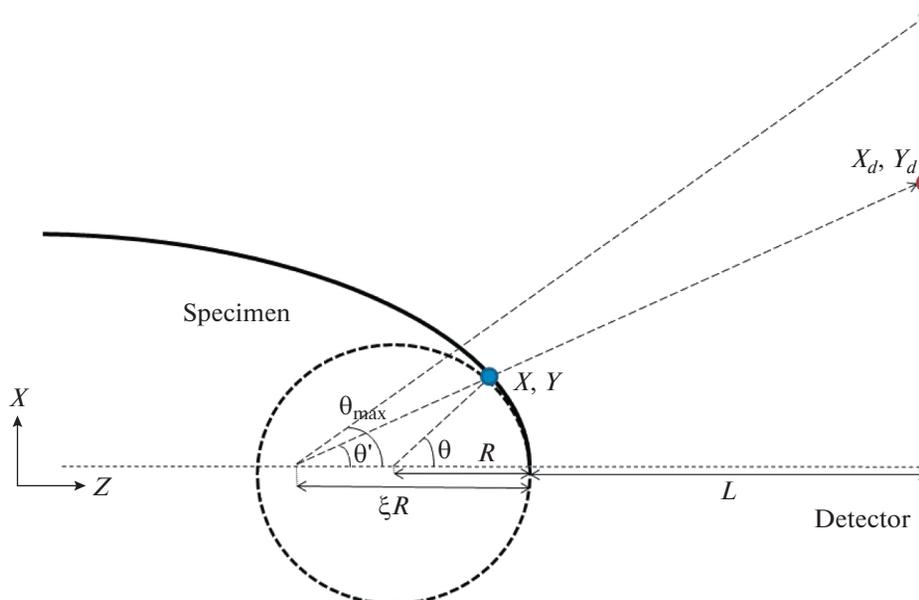


Рис. 1. Схематическое изображение соответствия точки на кончике образца (X, Y) и ее стереографической проекции на детекторе (X_d, Y_d). Представлено определения углов в модели стереографической проекции.

ем (Ω), эффективность детектирования и область зрения (детектируемая область образца) прибора. Некоторые параметры, такие как эффективность детектирования или область зрения прибора, являются характеристиками АЗТ установки и не изменяются во время АЗТ исследования. Однако другие параметры не постоянны, что не учитывает стандартный алгоритм. Например, ICF зависит от формы образца или электростатической системы установки [9, 10]. Для определения характера изменения этих параметров были проведены калибровочные исследования для различных типов АЗТ: ECOTAP [10], LAWATAP [11], LEAP 3000 [12]. Также было проведено моделирование полевого испарения для определения зависимости параметров реконструкции от различных условий испарения [7, 13, 14]. Таким образом, назрела необходимость модификации стандартного алгоритма трехмерной реконструкции, предложенного Басом и др [4] для установок типа ПАЗЛ-3Д.

1. ОПИСАНИЕ МЕТОДИКИ

В методе восстановления АЗТ данных [4] радиус кривизны острия образца R определяется напряжением U , приложенным к образцу. Для восстановления поперечных координат (X, Y) атомов используется стереографическая проекция (см. рис. 1):

$$X = R \sin(\varphi) \sin(\theta), \quad (1)$$

$$Y = R \cos(\varphi) \sin(\theta), \quad (2)$$

где θ — полярный угол, φ — азимутальный угол. Согласно алгоритму [4] радиус R пропорционален напряжению U :

$$R = \frac{U}{Ek_f}. \quad (3)$$

Следует отметить, что в стандартном алгоритме реконструкции полевой фактор k_f и поле испарения E остаются постоянными на протяжении всего АЗТ исследования. В тоже время в [15] было показано, что постоянство k_f приводит к неточной реконструкции морфологии фазовых включений и размеров всего исследуемого объема. Для решения этой проблемы были разработаны различные подходы.

В работе [16] было смоделировано влияние параметров реконструкции на восстановление АЗТ данных с помощью программного пакета LORENTZ 2D v9.0 [17]. Для испаряющей системы с локальным электродом была обнаружена прямая связь между параметрами реконструкции и геометрией образца вблизи вершины.

В работах [14, 15] были предложены различные подходы для определения параметров реконструкции: эмпирические измерения и сравнение реконструкций с использованием смоделированных и реальных данных.

В [14] моделирование полевого испарения в рамках модели, предложенной в [18], было использовано для получения зависимостей полевого фактора k_f и коэффициента сжатия изображения ICF от напряжения U , приложенного к АЗТ образцу для испарения атомов. Зависимость k_f

носила экспоненциальный характер ($k_f \sim \exp(U)$), а ICF была пропорциональна кубическому корню из k_f . Результаты моделирования показали хорошее согласие с экспериментальными данными. Исходными параметрами были начальный радиус кривизны и угол раствора образца. Отметим, что эти результаты не применимы к АЗТ установкам, разработанным в ИТЭФ, из-за отсутствия локального электрода и другой электростатической системы.

В настоящей работе предлагается подход к трехмерной реконструкции координат атомов, основанный на алгоритме Баса и функциях наложения k_f и ICF, откалиброванных с учетом соответствия восстановленной и реальной плотностей материала образца.

Координаты X и Y положения испаренного иона восстанавливаются с помощью стереографической проекции (рис. 1). Прямая связь между двумя углами θ и θ' и координатой Z может быть получена как:

$$\theta = \theta' + \arcsin(\xi - 1) \sin(\theta'), \quad (4)$$

$$z_i = \frac{\Omega N_i}{QR^2 \pi 2 \sin^2(\theta_{\max})} + R(1 - \cos(\theta)), \quad (5)$$

где θ – исходный угол вылета иона с поверхности образца (направление, перпендикулярное к поверхности образца), θ' – угол проекции с учетом отклонения траектории иона от направления вылета (сжатия траектории иона), Q – эффективность детектирующей системы, N_i – номер детектированного атома. Угол θ_{\max} – это максимальный угол детектирования испаренных атомов для используемой геометрии АЗТ установки (или угол детектирования). Уравнение (3) позволяет восстановить радиус в рамках алгоритма Баса. Впоследствии значение радиуса используется для восстановления координат. Важно отметить, что изменения k_f играют важную роль в вычислении координаты Z , поскольку они влияют на значения обеих частей в сумме (5). Первая часть в (5) оказывает прямое влияние на координату Z . Вторая часть (с ICF, входящей в θ) – поправка на кривизну поверхности. Таким образом, ICF влияет только на координаты X и Y . Чтобы продемонстрировать роль параметров реконструкции, одна и та же часть исследуемого образца была реконструирована с различными значениями k_f и ICF (см. рис. 2). Видно значительное влияние на геометрические размеры восстановленного объема. Как будет показано ниже, оптимальные значения k_f и ICF могут быть подобраны, если реконструированная плотность материала образца приведена в соответствие с реальной.

Следует отметить, что размер объема по оси Z не изменяется при изменении ICF при фиксированном значении k_f , изменяются только радиус R и угол θ . Как объяснялось выше, это является

следствием выбранного алгоритма реконструкции. Как показано на рис. 2 (внизу справа), атомная плотность не меняется с изменением k_f . Это связано с тем, что координаты X и Y пропорциональны радиусу, а Z обратно пропорциональна квадрату радиуса (см. уравнения (1), (2) и (5)). Таким образом, можно сделать вывод, что в алгоритме реконструкции k_f и ICF можно откалибровать отдельно.

Принимая во внимание все перечисленные детали, предлагается следующий алгоритм реконструкции. Первым шагом реконструкции является поиск динамического значения k_f , которое напрямую влияет на все три координаты. Поэтому на данном этапе целесообразно использовать эмпирическую калибровку, восстанавливающую кристаллические плоскости. Второй шаг – выбор динамического значения ICF, которое практически не меняет расстояния в направлении Z . На этом этапе можно использовать плотность материала для определения правильной зависимости ICF. Мы предлагаем определить параметры восстановления путем верификации восстанавливаемой плотности материала всему объему образца по ее реальному значению для материала.

Таким образом, при определении значений ICF и k_f будут использоваться известные значения межплоскостных расстояний в кристаллической решетке и атомная плотность материала. Согласно работам [14–16], можно предположить, что зависимости ICF (U) и $k_f(U)$, найденные для чистых материалов, будут одинаковыми и для сплавов на основе этих металлов. В данной статье эффективность предложенного алгоритма проверяется с применением обеих зависимостей.

2. МАТЕРИАЛЫ И ОБОРУДОВАНИЕ

Представленный в статье АЗТ анализ проводился на установке ПАЗЛ-3Д в НИЦ Курчатовский институт – ИТЭФ [19]. На установке ПАЗЛ-3Д используется лазерное полевое испарение, прямопролетная геометрия и программное обеспечение, разработанное в ИТЭФ. АЗТ образцы получали электрохимическим методом с использованием стандартных электролитов. Форма кончика образцов контролировалась с помощью просвечивающего электронного микроскопа JEOL 1200 EX. В процессе сбора данных температура образца составляла 21 К, скорость сбора данных составляла от 2 до 6 атомов на 1000 лазерных импульсов, энергия лазера составляла от 5 до 10 мВт, а частота 25 кГц. Для сплавов оптимальные условия испарения выбирались по методике, описанной в работе [20]. Для расчета масс-спектров с помощью этого программного обеспечения использовались процедуры автоматической калибровки и оптимизации [21].

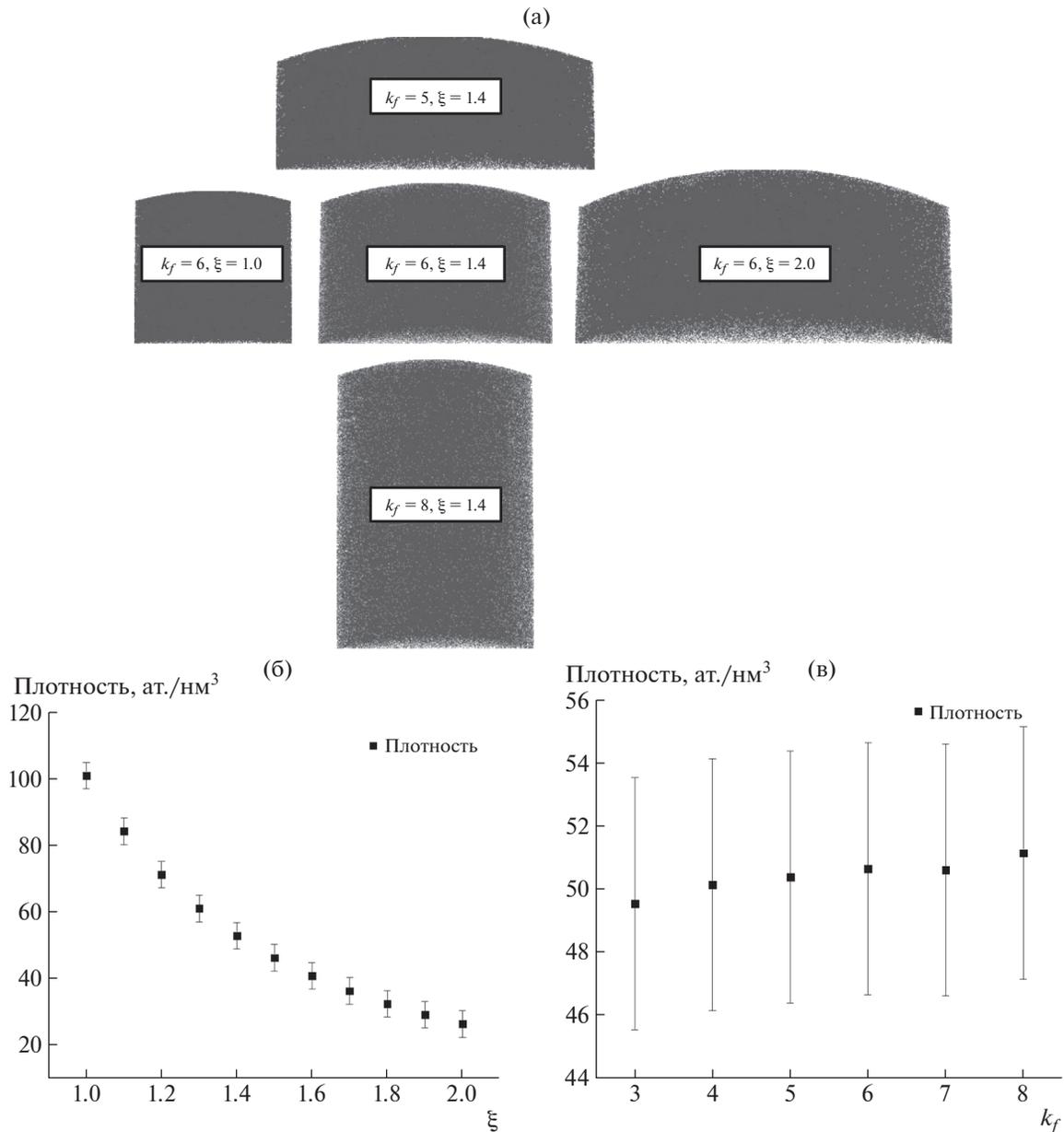


Рис. 2. (а) Карты атомов, построенные из одной и той же части исследуемого образца с различными параметрами k_f и ξ . (б) График атомной плотности как функции ξ . (в) График атомной плотности как функции фактора поля k_f .

Для восстановления массы и координат каждого атома использовалась программа КВАНТМ-3D [22]. Это программное обеспечение разработано в НИЦ “Курчатовский институт” – ИТЭФ и позволяет оперировать рядом функций, методов и алгоритмов.

Для поиска зависимостей $k_f(U)$ и $ICF(U)$ были выбраны алюминий и вольфрам с гранецентрированной и объемно-центрированной кубической кристаллической структурой, соответственно. Далее будут подробно описаны первый и второй этапы поиска зависимостей $k_f(U)$ и $ICF(U)$.

3. КАЛИБРОВКА МНОЖИТЕЛЯ ПОЛЯ

Как было написано выше, первым этапом алгоритма является поиск зависимости k_f от напряжения на образце U . Объем образца разбивается на мелкие части по оси Z . Для каждой детали подбирается оптимальное расстояние между кристаллографическими плоскостями. Теоретические расстояния между атомными плоскостями соответствующих кристаллографических направлений взяты из [5]. Кристаллографические направления определялись по картам полевой десорбции. На рис. 3 пред-

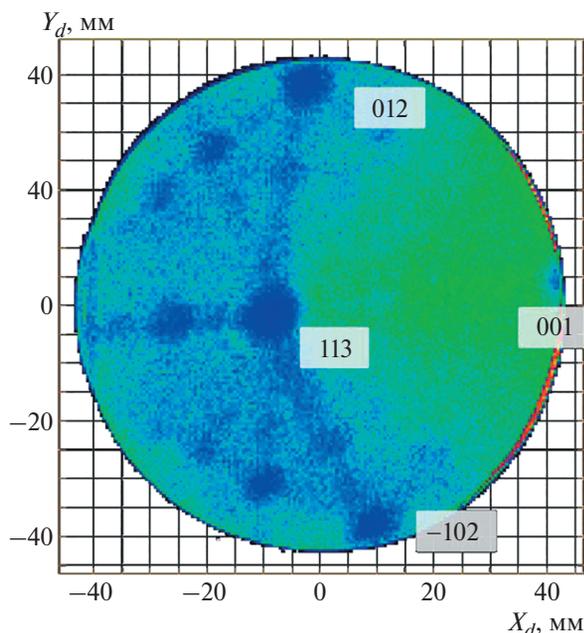


Рис. 3. Карты полевой десорбции алюминиевого образца. Указаны кристаллографические направления.

ставлен пример карты полевой десорбции образца алюминия, полученной на АЗТ детекторе.

Для калибровки было выбрано ближайшее к центру детектора направление. Для большинства образцов этими направлениями были $\{111\}$, $\{001\}$ и $\{113\}$. Информацию о межплоскостных расстояниях, соответствующих выбранному направлению, можно взять из [5]. На рис. 3 наиболее удобным направлением является $\{113\}$ с расстоянием между атомными плоскостями около 1.2 \AA . Далее объем образца разбивался на мелкие части по оси Z . Каждая часть содержала 10–30 атомных плоскостей. Таким образом, стало возможным найти значение k_f для каждого небольшого кусочка образца. Напряжение на образце в этих частях принималось постоянным для каждой из них. Полученные пары значений k_f и напряжения U аппроксимировались функциональной зависимостью [14]. Пример аппроксимации данных показан на рис. 4.

Описанная выше процедура была проведена для образцов из алюминия и вольфрама. k_f как функция напряжения U была получена для образцов с различными окончаниями. Из полученных данных была найдена общая зависимость $k_f(U)$:

$$k_f = (10 - C) + Ce^{-5.3e-4U}, \quad (6)$$

где C – подгоночная константа. Значение постоянной C зависит от состава материала. Например, для алюминия она равна 5.5, а для вольфрама – 4.5. Возможно, значение постоянной C зависит от по-

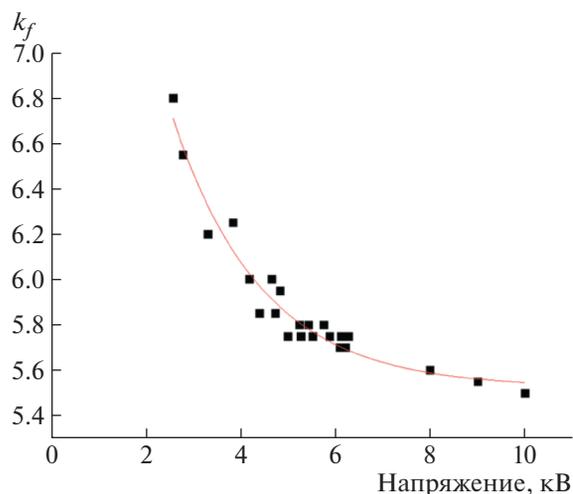


Рис. 4. Экспериментальные данные k_f и наилучшая аппроксимирующая кривая (6).

ля испарения материала. Явной разницы между коэффициентами (6) и углом раствора образца или начальным радиусом его вершины не обнаружено. Полученная зависимость $k_f(U)$ является экспоненциальной. Подобный характер зависимости был получен в работах [14, 16].

4. КАЛИБРОВКА КОЭФФИЦИЕНТА СЖАТИЯ ИЗОБРАЖЕНИЯ

Следующим шагом после восстановления значения k_f является корректировка значений ИСФ. Точность трехмерной реконструкции положения атомов в латеральном направлении недостаточна для идентификации кристаллической решетки. Согласно результатам, представленным на рис. 2, для получения значений ξ , обеспечивающих точность координат “сжатия” в плоскости XY , в качестве критерия может быть использована плотность. Такой же подход, с разделением большого объема на мелкие части, был использован для определения калибровочной кривой. Для каждой части были найдены значение k_f с использованием кристаллографических плоскостей и значение ξ с использованием плотности материала. Получена линейная зависимость ξ от напряжения на образце U , которая отличается от полученных зависимостей в аналогичных исследованиях [14, 15]. Это различие может быть связано с использованием режима лазерного испарения в ПАЗЛ-3D, тогда как в других установках [14, 15] для испарения также используется локальный электрод.

В программе анализа данных “КВАНТМ-3D” реализован инструмент “Линейная плотность” для построения графика атомной плотности вдоль выбранного направления. Атомная плотность рассчитывалась вдоль оси образца. Для наглядности

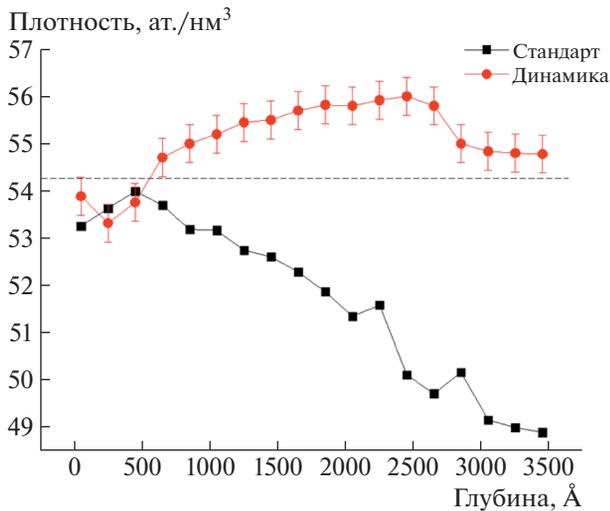


Рис. 5. Линейная атомная плотность для образца алюминия, полученная по стандартному протоколу и протоколу динамической реконструкции. Пунктирная линия показывает реальную плотность алюминия.

построен график с некоторым шагом. Примеры рассчитанных графиков плотности вдоль оси образца показаны на рис. 5 для алюминиевого образца с оптимизацией или без нее.

Необходимо учитывать коррекцию ожидаемой плотности с учетом эффективности детектирующей системы конкретного АЗТ прибора, чтобы сравнить полученные значения с теоретическими. На использованной установке ПАЗЛ-3D установлена система детектирования с микроканальными пластинами с эффективностью детектирования ~90%. В результате двух этапов калибровки были найдены динамические k_f и ξ . Далее необходимо проверить эти зависимости на чистых материалах.

5. АПРОБАЦИЯ МЕТОДИКИ НА ОБРАЗЦАХ АЛЮМИНИЯ И ВОЛЬФРАМА

Предлагаемый протокол был протестирован на чистых материалах Al и W. Вольфрам имеет объемно-центрированную кубическую кристаллическую структуру с постоянной решетки около 3.16 Å и 60.2 ат./нм³. Алюминий имеет гранецентрированную кубическую кристаллическую структуру с постоянной решетки около 4.05 Å и 63.6 ат./нм³. Всего было исследовано 12 образцов алюминия и вольфрама. Для проверки точности реконструкции использовался специальный инструмент для оценки расстояний между атомными плоскостями. Принцип этого инструмента основан на алгоритме распределения ближайших соседей k -го порядка [5]. В программе КВАНТМ-3D этот инструмент называется “KNN-krist”. По-

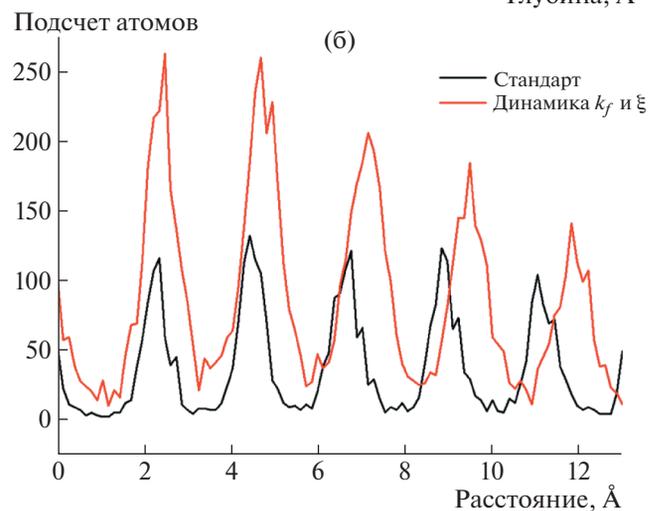
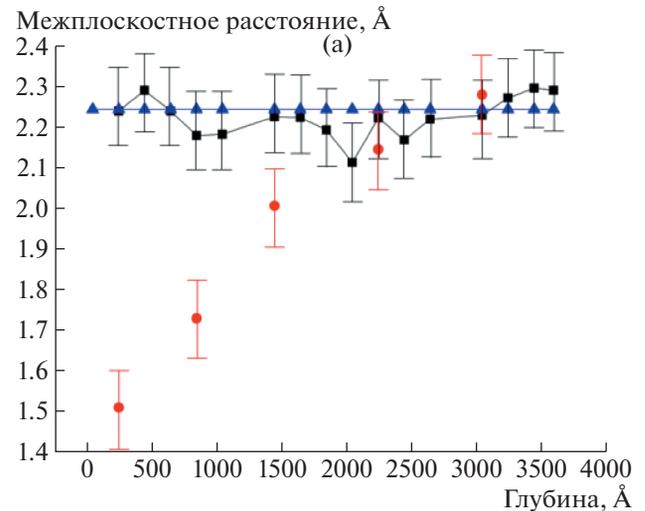


Рис. 6. (а) Расстояние между атомными плоскостями как функция глубины по оси Z образца, полученное в рамках стандартного протокола реконструкции (красный), динамического протокола определения k_f и ξ (черный) и теоретическим значением (синий). (б) Результат применения процедуры “KNN-krist” для стандартного и динамического алгоритмов восстановления.

иск соседей проводился только для атомов в выбранном направлении. Далее была построена гистограмма распределения расстояний между ближайшими соседними атомами (см. рис. 6б). Расстояния между атомными плоскостями на разной глубине по оси Z были рассчитаны для всех образцов в рамках стандартного и нового алгоритмов калибровки. Разница между этими алгоритмами показана на рис. 6.

На рис. 6а видно, что ошибка в межплоскостных расстояниях, полученных в начале и в конце сбора АЗТ данных, может достигать 50%. Важно отметить, что предлагаемые поправки могут значительно улучшить оценку размеров кластеров/фаз.

Кроме того, учет этой поправки повлияет на точность расчета размеров переходных слоев, фаз и зерен.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой статье был предложен алгоритм трехмерной реконструкции АЗТ данных с использованием контроля плотности материала в восстановленных атомных распределениях. Этот протокол основан на алгоритме восстановления Баса. Отличительной особенностью предложенного протокола является учет плотности материала вдоль выбранного направления для повышения точности восстановления данных. Динамические значения множителя поля k_f и коэффициента сжатия изображения ξ были определены экспериментально с использованием значений межплоскостных кристаллографических расстояний и значений плотности материалов.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование методом атомно-зондовой томографии проводилось в Центре коллективного пользования КАМИКС (<http://kamiks.iterp.ru/>) Института теоретической и экспериментальной физики НИЦ “Курчатовский институт”.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

- Giddings A.D., Ramvall P., Vasen T., Afzaljan A., Hwang R. // *ASC Appl. Nano Mater.* 2019. V. 2 (3). P. 1253–1258.
- Rogozhkin S.V., Nikitin A.A., Khomich A.A., Lukyanchuk A.A., Raznitsyn O.A., Shutov A.S., Fedin P.A., Kulevov T.V., Vasiliev A.L., Presniakov M.Yu., Möeslang A., Lindau R., P. Vladimirov // *Nucl. Fusion.* 2019. V. 59. P. 086018. <https://doi.org/10.1088/1741-4326/ab1e18>
- Lefebvre-Ulrikson W., Vurpillot F., Sauvage X. *Atom Probe Tomography Put Theory into Practice.* 2016. Amsterdam: Elsevier. P. 183–249. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-804647-0.00007-3>
- Bas P., Bostel A., Deconihout B., Blavette D. // *Appl. Surf. Sci.* 1995. V. 87. P. 298–304. [https://doi.org/10.1016/0169-4332\(94\)00561-3](https://doi.org/10.1016/0169-4332(94)00561-3)
- Gault B., Moody M.P., Cairney J.M., Ringer S. *Atom Probe Microscopy.* 2012. London: Springer. <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-3436-8>
- Gault B., Haley D., de Geuser F., Larson D.J., Marquis E.A., Geiser B.P. // *Ultramicroscopy.* 2011. V. 111 (6). P. 448–457. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2010.11.016>
- Vurpillot F., Gruber M., Da Costa G., Martin I., Renaud L., Bostel A. // *Ultramicroscopy.* 2011. V. 111 (8). P. 1286–1294. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2011.04.001>
- Larson D., Geiser B., Prosa T., Ulfing R., Kelly T. // *Microsc. Microanal.* 2011. V. 17 (S2). P. 740–741. <https://doi.org/10.1017/S1431927611004570>
- Gipson G.S. // *J. Appl. Phys.* 1980. V. 51. P. 3884. <https://doi.org/10.1063/1.328134>
- Geiser B.P., Larson D.J., Oltman E., Gerstl S., Reinhard D., Kelly T.F., Prosa T.J. // *Microsc. Microanal.* 2009. V. 15 (S2). P. 292–293. <https://doi.org/10.1017/S1431927609098249>
- Renaud L. // *Microsc. Microanal.* 2003. V. 9 (S02). P. 566–567. <https://doi.org/10.1017/S1431927603442839>
- Renaud L., Monsallut P., Benard P., Saliot P., Costa G.D., Vurpillot F., Deconihout B. // *Microsc. Microanal.* 2006. V. 12. P. 1726–1727. <https://doi.org/10.1017/S1431927606063410>
- Miller M.K., Forbes R.G. *Atom Probe Tomography: The Local Electrode Atom Probe.* 2014. New York: Springer. <https://doi.org/10.1007/978-1-4899-7430-3>
- Hatzoglou C., Da Costa G., Vurpillot F. // *Ultramicroscopy.* 2019. V. 197. P. 72–82. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2018.11.010>
- Gault B., Loi S.T., Araullo-Peters V.J., Stephenson L.T., Moody M.P., Shrestha S.L., Marceau R.K.W., Yao L., Cairney J.M., Ringer S.P. // *Ultramicroscopy.* 2011. V. 111. P. 1619–1624. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2011.08.005>
- Loi S.T., Gault B., Ringer S.P., Larson D.J., Geiser B.P. // *Ultramicroscopy.* 2013. V. 132. P. 107–113. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2012.12.012>
- Asi A. // *Rev. Sci. Instrum.* 2002. V. 73. P. 780. <https://doi.org/10.1063/1.1430867>
- Vurpillot F., Gaillard A., Da Costa G., Deconihout B. // *Ultramicroscopy.* 2013. V. 132. P. 152–157. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2012.12.007>
- Рогожкин С.В., Алеев А.А., Лукьянчук А.А., Шутов А.С., Разницын О.А., Кириллов С.Е. // *Приборы и техника эксперимента.* 2017. № 3. С. 129–134. <https://doi.org/10.7868/S0032816217020227>
- Raznitsyn O.A., Lukyanchuk A.A., Shutov A.S., et al. // *J. Anal. Chem.* 2017. V. 72. No. 14. P. 1404. <https://doi.org/10.1134/S1061934817140118>
- Shutov A.S., Lukyanchuk A.A., Rogozhkin S.V., Raznitsyn O.A., Nikitin A.A., Aleev A.A., Kirillov S.E. // *Phys. At. Nucl.* 2019. V. 82. P. 1292–1301. <https://doi.org/10.1134/S1063778819090096>
- Software Certificate No. RU2018661876. <http://www1.fips.ru/>

Atom Probe Tomography Data Reconstruction with the Correction on Material Density

**A. A. Lukyanchuk^{1, 2}, A. A. Aleev¹, A. S. Shutov^{1, 2},
O. A. Raznitsyn^{1, 2}, C. E. Kirillov¹, and S. V. Rogozhkin^{1, 2, *}**

¹*National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, 123182 Russia*

²*National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia*

**e-mail: rogozhkin@itep.ru*

Received October 5, 2021; revised October 5, 2021; accepted October 5, 2021

Abstract—Data collected with an atom probe tomograph allow to reconstruct 3D atom maps of chemical element atoms with high accuracy. Due to the permanent improvement of AP installations, new 3D reconstruction procedures are required. This work proposes an improved approach for atom probe data reconstruction which uses dynamic parameters and a calibration based on the material density.

Keywords: atom probe tomography, 3D reconstruction, atomic distribution