

**федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ГИДРОМЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

Кафедра высшей математики и физики

Фонд оценочных средств дисциплины

Б1.В.1.04 Физика поверхности и тонких пленок


Основная профессиональная образовательная программа
высшего образования по направлению подготовки
(сетевая форма реализации)

03.04.01 Прикладные математика и физика

Направленность (профиль):
«Физические исследования инновационных материалов»

Уровень:
Магистратура

Форма обучения
Очная

Рассмотрено и утверждено на заседании кафедры
08.09.2022 г., протокол № 2
Зав. кафедрой  Зайцева И.В.

Автор-разработчик:
д.т.н, Дьяченко Н.В.,
к.т.н., Старицын М.В.

1. Паспорт Фонда оценочных средств по дисциплине

«Физика поверхности и тонких пленок»

Таблица 1. Перечень оценочных средств текущего контроля

№ п/п	Тема дисциплины	Формируемые компетенции	Наименование средств текущего контроля
1	Введение	ПК-1.1; ПК-3.1	Устный опрос
2	Основы двумерной кристаллографии	ПК-1.1; ПК-3.1	Устная защита выполнения практической работы № 1
3	Методы анализа поверхности	ПК-1.1; ПК-3.1	Устная защита выполнения практической работы № 2
4	Атомная структура чистых поверхностей и поверхностей с адсорбатами	ПК-1.1; ПК-3.1	Устная защита выполнения практической работы № 3
	Текущий контроль успеваемости (ТКУ)	ПК-1.1; ПК-3.1	Тест в Moodle
5	Структурные дефекты поверхности	ПК-1.1; ПК-3.1	Устная защита выполнения практической работы № 4
6	Электронные свойства поверхности	ПК-1.1; ПК-3.1	Устная защита выполнения практической работы № 5
7	Элементарные процессы на поверхности	ПК-1.1; ПК-3.1	Устная защита выполнения практической работы № 6
8	Рост тонких пленок на поверхности	ПК-1.1; ПК-3.1	Устная защита выполнения практической работы № 7
9	Атомные манипуляции на поверхности и формирование наноструктур	ПК-1.1; ПК-3.1	Устная защита выполнения практической работы № 8
Форма промежуточной аттестации:			Экзамен

2. Перечень компетенций, с указанием этапов их формирования в процессе освоения дисциплины

Таблица 2. Перечень компетенций, формируемых в процессе освоения дисциплины

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	Виды оценочных средств
<p>ПК-1. Способен использовать специализированные знания о выбранных объектах исследований для проведения научных исследований с использованием современных информационных технологий</p> <p>ПК-1.1. Применяет специальные знания для исследования структуры и свойств новых материалов</p>	<p>Знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> – физическую сущность явлений, протекающих на поверхности твердого тела, основы формирования наноразмерных структур 	<p>Задания практико-ориентированного уровня:</p> <p>Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>
	<p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – выполнять количественные оценки величины эффектов и характеристических параметров с учётом особенностей кристаллической структуры, электронного и фононного спектров, типа и концентрации примесей 	<p>Задания практико-ориентированного уровня:</p> <p>Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>
	<p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – навыками решения задач физики поверхности, анализа физического смысла полученных решений 	<p>Задания практико-ориентированного уровня:</p> <p>Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>
<p>ПК-3. Способен к анализу проблемы, постановке цели научного исследования, выбору средств ее достижения</p> <p>ПК-3.1. Критически анализирует современные проблемы в избранной области исследований</p>	<p>Знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> – принципы и общую методику физического эксперимента с использованием установок для исследования структуры, состава и физических свойств поверхности и тонких пленок; 	<p>Задания практико-ориентированного уровня:</p> <p>Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>
	<p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – выбирать методы и типы оборудования для получения информации о составе и структуре поверхности материалов 	<p>Задания практико-ориентированного уровня:</p> <p>Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>
	<p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> – навыками сравнительного анализа полученных результатов у различных исследователей 	<p>Задания практико-ориентированного уровня:</p> <p>Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>

3. Балльно-рейтинговая система оценивания

Таблица 3. Распределение баллов по видам учебной работы

Вид учебной работы, за которую ставятся баллы	Баллы
Текущий контроль успеваемости	0-100
Промежуточная аттестация	0-30
ИТОГО	0-100

Таблица 3.1. Распределение баллов по текущему контролю

№	Вид работ	Min	Max
1. Обязательная часть			
1.1 Текущий контроль успеваемости по проверке форсированности остаточных знаний			
Текущий контроль успеваемости. Тест:		0	10
1.2 Выполнение практических работ:			
1.2.1	Практическая работа № 1. Основы двумерной кристаллографии	4	6
1.2.2	Практическая работа № 2. Методы анализа поверхности	3	4
1.2.3	Практическая работа № 3. Атомная структура чистых поверхностей и поверхностей с адсорбатами	4	6
1.2.4	Практическая работа № 4. Структурные дефекты поверхности	3	4
1.2.5	Практическая работа № 5. Электронные свойства поверхности	2	4
1.2.6	Практическая работа № 6. Элементарные процессы на поверхности	4	6
Итого баллов по обязательной части		20	40
2. Вариативная часть			
2.1	Реферат по дисциплине: «Физика поверхности и тонких пленок»	1	5
2.2	Участие в НИРС	10	25
2.3	Участник клуба МиФ	1	10
2.4	Участие в олимпиаде (физика, математика)	5	10
2.4.1	участие	5	5
2.4.2	призер	10	10
2.5	Публикация в индексируемом журнале (совместно с преподавателем)	10	10
2.6	Акселерационная программа/ проект Росмолодежи	20	40
2.6.1	участие	20	20

2.6.2	грант	40	40
	Промежуточная аттестация по дисциплине	0	30
Итого баллов по вариативной части		40	60
Итого баллов по дисциплине			100

Таблица 3.2. Конвертация баллов в итоговую оценку

Оценка	Баллы
Отлично	85-100
Хорошо	64-84
Удовлетворительно	40-63
Неудовлетворительно	0-39

4. Содержание оценочных средств текущего контроля. Критерии оценивания

Перечень учебно-методического и информационного обеспечения самостоятельной работы обучающихся по дисциплине, в том числе по подготовке к текущему контролю и промежуточной аттестации представлены в рабочих программах и методических рекомендациях для обучающихся по освоению дисциплины.

Перечень практических работ, методика выполнения и критерии оценивания по темам дисциплины:

Практическая работа № 1. Основы двумерной кристаллографии:

Цель работы: экспериментально освоить принципы симметрии двумерных кристаллических решеток путем построения и анализа моделей плоских сингоний, а также идентифицировать элементы симметрии в заданных двумерных структурах.

Физико-химические основы процесса

Двумерная кристаллография изучает симметрию и структуру объектов в плоскости. Её основы критически важны для понимания поверхностных явлений, физики тонких плёнок, свойств графена и других 2D-материалов. Основными элементами симметрии в двумерном пространстве являются:

1. Трансляция – перенос узла решётки на вектор трансляции.
2. Поворотная симметрия – совмещение решётки с собой при повороте на угол $360^\circ/n$ вокруг точки (n – порядок оси). В кристаллических решётках возможны лишь оси 1, 2, 3, 4 и 6-го порядков (ограничение теоремы кристаллографии).
3. Зеркальная симметрия – отражение в зеркальной линии (аналог плоскости в 3D).

Комбинация этих элементов порождает пять видов плоских решёток Браве: косую, прямоугольную, центрированную прямоугольную, квадратную и гексагональную, которые группируются в четыре сингонии (низшая – триклинная, средние – моноклинная и ромбическая, высшая – гексагональная).

Экспериментальная методика и оборудование

Методика основана на визуальном конструировании и анализе моделей двумерных решёток. Используемое оборудование и материалы: листы миллиметровой бумаги, чертёжные инструменты (линейка, угольник, транспортир), ножницы, клей, наборы шаблонов с изображением молекул или атомов разной симметрии, увеличительное стекло.

Характеристика анализируемых материалов / получаемых продуктов

1. Модели двумерных решёток: Графические конструкции, отображающие периодическое расположение узлов (атомов) в плоскости.
2. Элементы симметрии: Нанесённые на модели оси поворота, линии зеркального отражения и векторы трансляции.
3. Анализируемые структуры: Распечатанные изображения поверхностных слоёв кристаллов, молекулярных монослоев или природных паттернов.

Ход работы

Построение моделей плоских решёток Браве

На листе миллиметровой бумаги строят элементарные ячейки всех пяти типов плоских решёток Браве. Для косой решётки выбирают произвольный параллелограмм, для прямоугольной – прямоугольник, для центрированной прямоугольной – прямоугольник с узлом в центре, для квадратной – квадрат, для гексагональной – ромб с углом 60° . В узлах решёток рисуют условные изображения атомов. Для каждой решётки определяют и подписывают векторы трансляции, выделяют все элементы симметрии: находят и обозначают линии зеркального отражения, точки поворота и соответствующие оси симметрии, указывая их порядок.

Создание двумерных кристаллов с точечными группами симметрии

Используя подготовленные шаблоны молекул, обладающие определённой симметрией (например, треугольные, квадратные, гексагональные), размещают их в узлах построенных решёток Браве. Анализируют, как сочетание симметрии мотива и симметрии решётки порождает итоговую точечную группу симметрии всего двумерного «кристалла». Составляют таблицу, в которой фиксируют тип решётки Браве, симметрию мотива и результирующую точечную группу симметрии структуры.

Идентификация сингоний и элементов симметрии в реальных объектах

Выдают набор изображений, включающий микрофотографии поверхностей кристаллов, схемы упаковки молекул в монослоях, паттерны на крыльях насекомых или геометрические орнаменты. С помощью увеличительного стекла и чертёжных инструментов на кальке или прозрачной плёнке, наложенной на изображение, идентифицируют и выделяют элементарную ячейку, определяют тип решётки Браве. Находят и отмечают все присутствующие элементы симметрии, включая оси и зеркальные линии. На основе проведённого анализа определяют сингонию каждого исследуемого объекта.

Оформление отчета

Отчет по практической работе должен содержать следующие разделы:

1. Титульный лист (название работы, ФИО студента, группа, дата).
2. Цель работы.
3. Теоретическая часть: Краткое описание элементов симметрии в двумерном пространстве, формулировка ограничения на порядок осей симметрии, классификация плоских решёток Браве и сингоний.
4. Экспериментальная часть: Описание последовательности построения моделей и методики анализа изображений.
5. Результаты и расчеты:
 - 1) Рисунки построенных моделей всех пяти решёток Браве с выделенными элементарными ячейками и элементами симметрии.
 - 2) Таблица, демонстрирующая формирование точечных групп симметрии при комбинации мотива и решётки.
 - 3) Зарисовки или копии анализируемых изображений с нанесёнными элементарными ячейками и элементами симметрии.
 - 4) Сводная таблица с результатами идентификации сингоний для каждого исследуемого объекта.
6. Выводы: формулируются выводы о взаимосвязи между типом решётки Браве и элементами симметрии, о правилах комбинации симметрии мотива и решётки, а

также о применимости законов двумерной кристаллографии к анализу реальных объектов.

Практическая работа № 2. Методы анализа поверхности:

Цель работы: ознакомиться с принципами работы сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) и рентгеновского фотоэлектронного спектрометра (РФЭС) на примере анализа морфологии и элементного состава поверхности металлического образца после окисления.

Физико-химические основы процесса

Современные методы анализа поверхности позволяют получать информацию о морфологии, химическом составе и электронной структуре самых верхних атомных слоев материала, что определяет его каталитические, адсорбционные и коррозионные свойства. В данной работе рассматриваются два ключевых метода:

1. Сканирующая электронная микроскопия (СЭМ): Основана на зондировании поверхности сфокусированным пучком высокоэнергетических электронов. Регистрируются вторичные и обратнорассеянные электроны, что позволяет получать изображение поверхности с высоким разрешением (до нанометров) и большей глубиной резкости по сравнению с оптическим микроскопом.
2. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС или XPS): Основана на фотоэлектрическом эффекте. Поверхность облучается рентгеновскими лучами, что вызывает эмиссию фотоэлектронов с внутренних атомных орбиталей. Измеряя их кинетическую энергию, можно определить энергию связи, которая является уникальной для каждого химического элемента и его валентного состояния. РФЭС — высокочувствительный метод, позволяющий проводить количественный анализ и определять химическое состояние элементов в приповерхностном слое (1-10 нм).

Экспериментальная методика и оборудование

Методика основана на сравнительном анализе одного и того же образца до и после химической обработки (окисления) с использованием комплекса методов. Используемое оборудование: сканирующий электронный микроскоп с приставкой для энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДС), рентгеновский фотоэлектронный спектрометр. Основные материалы: образец из нержавеющей стали или титанового сплава, шлифовальные и полировальные материалы, муфельная печь.

Характеристика анализируемых материалов / получаемых продуктов

1. Исходный образец: Полированная пластина металла (например, нержавеющая сталь) с гладкой поверхностью.
2. Окисленный образец: Образец после термического окисления на воздухе при температуре 500–700 °С в течение 1–2 часов. На поверхности формируется слой оксида, изменяющий морфологию и состав.

Ход работы

Подготовка образцов

Металлический образец тщательно подготавливают путем последовательной шлифовки абразивными бумагами с уменьшающимся размером зерна и последующей полировки до зеркального блеска для получения референсной поверхности. Подготовленный образец промывают в ультразвуковой ванне с органическим растворителем для удаления загрязнений. Образец делят на две части. Одну часть сохраняют в исходном состоянии, вторую часть помещают в муфельную печь и проводят термическое окисление на воздухе при заданной температуре и времени.

Проведение анализа на сканирующем электронном микроскопе. Подготовленные образцы (исходный и окисленный) устанавливают в держатель СЭМ, обеспечивая хороший электрический контакт для предотвращения накопления заряда. Камеру микроскопа вакуумируют. Проводят анализ образцов при различных увеличениях, получая СЭМ-изображения в режимах вторичных и обратнорассеянных электронов. Сравнивают морфологию поверхности исходного и окисленного образцов, отмечая появление продуктов окисления, изменение рельефа и шероховатости. Для окисленного образца проводят локальный элементный анализ с помощью энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДС), определяя качественный и полуколичественный состав в различных точках поверхности.

Проведение анализа на рентгеновском фотоэлектронном спектрометре. Исходный и окисленный образцы переносят в спектрометр. Камеру прибора вакуумируют до сверхвысокого вакуума. Проводят обзорный (survey) анализ для идентификации всех элементов, присутствующих на поверхности. Затем записывают высокоразрешенные спектры для ключевых элементов (например, Fe 2p, Cr 2p, O 1s для нержавеющей стали). Анализируют форму пиков и положение их максимумов, что позволяет определить химическое состояние элементов (металл, оксид). Проводят количественную обработку данных, рассчитывая атомные концентрации элементов на поверхности.

Обработка и сопоставление результатов. Проводят сравнительный анализ данных, полученных обоими методами. На основе СЭМ-изображений описывают изменение морфологии поверхности после окисления. Данные ЭДС-анализа (СЭМ) и количественного РФЭС-анализа сопоставляют для оценки элементного состава. На основе высокоразрешенных РФЭС-спектров делают вывод о химическом состоянии элементов в оксидной пленке.

Оформление отчета

Отчет по практической работе должен содержать следующие разделы:

1. Титульный лист (название работы, ФИО студента, группа, дата).
2. Цель работы.
3. Теоретическая часть: Физические принципы методов СЭМ и РФЭС, виды получаемой информации, их возможности и ограничения.
4. Экспериментальная часть: Описание подготовки образцов, режимов окисления и условий проведения измерений на каждом приборе.
5. Результаты и расчеты:
 - 1) Представить СЭМ-изображения исходного и окисленного образцов с описанием наблюдаемых особенностей морфологии.
 - 2) Привести спектры ЭДС-анализа для окисленного образца.
 - 3) Привести обзорные и высокоразрешенные РФЭС-спектры для исходного и окисленного образцов.
 - 4) Представить таблицу с количественными результатами РФЭС-анализа (атомные проценты) для обоих образцов.
 - 5) Провести анализ химических сдвигов в РФЭС-спектрах.
6. Выводы: сформулировать комплексные выводы о влиянии термического окисления на морфологию и химический состав поверхности металла. Оценить вклад каждого из методов в общее понимание процессов, протекающих на поверхности. Обсудить, как сочетание методов позволяет получить более полную информацию, чем каждый метод в отдельности.

Практическая работа № 3. Структурные дефекты поверхности:

Цель работы: экспериментально исследовать различные типы структурных дефектов на поверхности монокристалла меди методом химического травления и металлографической микроскопии, определить плотность дислокаций и охарактеризовать макроскопические дефекты.

Физико-химические основы процесса

Идеальная кристаллическая структура существует лишь теоретически. Реальные кристаллы содержат дефекты, которые существенно влияют на их механические, электрические и химические свойства. На поверхности дефекты проявляются особенно ярко, так как именно здесь нарушается периодичность решетки. Основные типы структурных дефектов:

1. Точечные дефекты: Вакансии, межузельные атомы, примесные атомы. На поверхности проявляются как активные центры для адсорбции.
2. Линейные дефекты (дислокации): Краевые и винтовые дислокации. Их выход на поверхность создает ступеньки, которые являются участками с повышенной реакционной способностью.
3. Поверхностные дефекты: Границы зерен, двойниковые границы, границы блоков (субзерен). Эти дефекты представляют собой области искажения кристаллической решетки.
4. Объемные дефекты: Поры, трещины, включения. Метод селективного химического травления основан на различной скорости растворения материала в области дефекта и совершенной решетки. Травитель предпочтительно атакует области с искаженной решеткой (выходы дислокаций, границы зерен), образуя ямки травления (питтинги) или канавки, которые затем наблюдаются под микроскопом.

Экспериментальная методика и оборудование

Методика основана на контрастировании дефектов структуры с помощью химического травления с последующей микроскопией. Используемое оборудование: металлографический микроскоп, шлифовально-полировальный станок, ультразвуковая ванна, химическая посуда. Основные материалы: монокристаллическая или крупнозернистая поликристаллическая медь, абразивные материалы, полировальные суспензии, травитель (например, раствор на основе хромового ангидрида CrO_3 и соляной кислоты HCl или раствора аммиака и пероксида водорода).

Характеристика анализируемых материалов / получаемых продуктов

1. Исходный образец: Полированная пластина меди с зеркальной поверхностью, на которой дефекты не видны.
2. Протравленный образец: Поверхность меди с выявленными ямками травления (соответствуют выходам дислокаций), канавками (соответствуют границам зерен) и другими особенностями.
3. Дефектная структура: Визуализированная картина расположения дислокаций, границ зерен и двойников.

Ход работы

Подготовка

поверхности

образца

Пластины монокристаллической или поликристаллической меди подвергают стандартной процедуре металлографической подготовки. Последовательно шлифуют поверхность на абразивных бумагах с уменьшающимся размером зерна для удаления поврежденного слоя и выравнивания поверхности. Затем проводят тонкую полировку

с использованием алмазной или оксидной алюминиевой суспензии для получения поверхности без царапин и с зеркальным блеском. После каждого этапа образец тщательно промывают и обезжиривают.

Химическое травление для выявления дефектов
Приготавливают травильный раствор, состав которого подобран для селективного травления меди. Полированную поверхность образца помещают в раствор на строго определенное время (от нескольких секунд до минуты) при комнатной температуре без перемешивания. После травления образец немедленно извлекают и тщательно промывают в проточной воде, затем в дистиллированной воде и сушат в струе воздуха. Важно не перетравить образец, чтобы не разрушить мелкие детали структуры.

Микроскопический анализ дефектной структуры
Подготовленный образец помещают под металлографический микроскоп. Проводят обзорный осмотр поверхности при малом увеличении для идентификации макроскопических дефектов: границ зерен, двойников, трещин. Затем переходят к большому увеличению для изучения дислокационной структуры. В нескольких полях зрения, характерных для образца, проводят фотографирование или зарисовку микроструктуры. Проводят подсчет количества ямок травления (дислокаций) в пределах известной площади. Измеряют размеры зерен, используя линейку или метод секущих.

Обработка результатов измерений
На основе данных подсчета ямок травления рассчитывают плотность дислокаций как отношение количества ямок к площади, на которой проводился подсчет. Определяют средний размер зерна по результатам измерений. Составляют схематическое изображение поверхности, на котором обозначают все наблюдаемые типы дефектов: ямки травления (дислокации), границы зерен, двойники, линии скольжения.

Оформление отчета

Отчет по практической работе должен содержать следующие разделы:

1. Титульный лист (название работы, ФИО студента, группа, дата).
2. Цель работы.
3. Теоретическая часть: Классификация структурных дефектов в кристаллах, механизм их взаимодействия с травителем, принцип метода ямок травления.
4. Экспериментальная часть: Описание подготовки поверхности, состава травителя и условий травления, методики микроскопического анализа.
5. Результаты и расчеты:
 - 1) Фотографии или зарисовки микроструктуры при малом и большом увеличении с обозначением типов дефектов.
 - 2) Результаты подсчета ямок травления и расчета плотности дислокаций.
 - 3) Результаты измерения размеров зерен.
 - 4) Схематическое изображение дефектной структуры поверхности.
6. Выводы: на основе проведенного анализа формулируются выводы о преобладающих типах дефектов на исследованной поверхности, количественной оценке плотности дислокаций и размера зерна. Обсуждается связь между условиями подготовки образца (механическая обработка, возможный отжиг) и наблюдаемой дефектной структурой. Оценивается эффективность использованной методики травления для выявления дефектов.

Практическая работа № 4. Атомная структура чистых поверхностей и поверхностей с адсорбатами:

Цель работы: смоделировать методом компьютерного молекулярного моделирования атомную структуру чистой поверхности меди и исследовать её изменение в процессе адсорбции кислорода.

Физико-химические основы процесса

Атомная структура поверхности кристалла отличается от объёмной структуры. Атомы поверхностного слоя имеют пониженную координацию, что приводит к релаксации (изменению межатомных расстояний между слоями) и реконструкции (изменению двумерной симметрии поверхностной ячейки). Чистая поверхность стремится минимизировать свою свободную энергию. При адсорбции атомов или молекул из газовой фазы адсорбат взаимодействует с поверхностными атомами, что может стабилизировать или индуцировать реконструкцию, приводя к образованию упорядоченных надструктур. Для описания этих структур используется матричная нотация Вуда, которая связывает периоды поверхностной решётки с периодами подложки. Изучение этих процессов критически важно для понимания катализа, коррозии и эпитаксиального роста.

Экспериментальная методика и оборудование

В связи с тем, что прямое экспериментальное наблюдение атомной структуры в реальном времени требует сложного оборудования (сканирующая туннельная микроскопия, дифракция медленных электронов), в данной работе используется метод компьютерного моделирования. Методика основана на использовании программного обеспечения для молекулярного моделирования и визуализации кристаллических структур. Используемое оборудование: персональный компьютер с установленным специализированным ПО (например, VESTA, Crystal Maker). Основные материалы: кристаллографические данные для меди (параметр решётки $a = 0.3615$ нм, ГЦК-структура).

Характеристика анализируемых материалов / получаемых продуктов

1. Чистая поверхность меди: Модель кристалла с выделенной кристаллографической плоскостью, например, (100), (110) или (111).
2. Поверхность с адсорбатом: Модель, в которой атомы кислорода размещены в определённых позициях на поверхности меди (например, в позициях «мостик» или «впадина»).
3. Надструктура: Упорядоченное расположение адсорбированных атомов, образующее ячейку, отличную от ячейки чистой поверхности.

Ход работы

Построение модели чистой поверхности

С использованием программного обеспечения создают объёмную модель кристалла меди на основе её кристаллографических данных. Выбирают кристаллографическую плоскость с низкими индексами Миллера, например, (100). Строят модель среза кристалла, создавая поверхность выбранной ориентации. Визуализируют полученную поверхность, обращая внимание на расположение и координацию атомов поверхностного слоя. Определяют и зарисовывают элементарную ячейку чистой поверхности, измеряют её геометрические параметры. Описывают симметрию полученной поверхности.

Моделирование процесса адсорбции

На построенную модель чистой поверхности размещают атомы адсорбата (кислорода) в различных возможных позициях: он-топ (над атомом подложки), мостиковая (над связью между двумя атомами), трёхкратная впадина (в углублении между тремя атомами). Для каждой конфигурации визуально оценивают геометрическое соответствие размеров

адсорбата и полостей поверхностной решётки. Выбирают наиболее вероятную позицию, исходя из принципа максимального координационного числа адсорбата. Создают модель поверхности с упорядоченным монослоем адсорбированного кислорода, размещая атомы в выбранных позициях с определённым периодом.

Анализ образовавшейся надрешетки
Анализируют полученную структуру «поверхность-адсорбат». Определяют элементарную ячейку новой поверхностной структуры. Сравнивают её размер и ориентацию с элементарной ячейкой чистой поверхности. Определяют матрицу преобразования, описывающую взаимосвязь между ячейкой чистой поверхности и ячейкой надструктуры. Записывают структуру в нотации Вуда. Анализируют, как изменилась симметрия поверхности после адсорбции. Оценивают, произошла ли адсорбционно-индуцированная реконструкция — значительное перераспределение атомов подложки.

Сравнительный анализ поверхностей разной ориентации
Повторяют процедуру моделирования для поверхности меди другой ориентации, например, (110). Сравнивают атомное строение чистых поверхностей (100) и (110), отмечая разницу в плотности упаковки атомов и их координации. Исследуют, в каких позициях адсорбция кислорода наиболее вероятна на каждой из поверхностей. Сравнивают стабильные надструктуры, образующиеся на поверхностях разной ориентации.

Оформление отчета

Отчет по практической работе должен содержать следующие разделы:

1. Титульный лист (название работы, ФИО студента, группа, дата).
2. Цель работы.
3. Теоретическая часть: Понятия релаксации и реконструкции поверхностей, виды адсорбционных позиций, описание нотации Вуда для поверхностных структур.
4. Экспериментальная часть: Описание использованного программного обеспечения и последовательности действий при моделировании.
5. Результаты и расчеты:
 - 1) Рисунки моделей чистых поверхностей Cu(100) и Cu(110) с выделенными элементарными ячейками.
 - 2) Рисунки, иллюстрирующие различные адсорбционные позиции на одной из поверхностей.
 - 3) Рисунки стабильных надструктур кислорода на Cu(100) и Cu(110).
 - 4) Определение матриц преобразования и запись структур в нотации Вуда.
 - 5) Сравнительная таблица свойств чистых поверхностей и поверхностей с адсорбатом.
6. Выводы: формулируются выводы о взаимосвязи между кристаллографической ориентацией поверхности и её атомным строением, о предпочтительных позициях адсорбции и их зависимости от геометрии поверхности, о типе и параметрах образующихся надрешеток. Обсуждается влияние адсорбции на симметрию и структуру поверхности.

Практическая работа № 5. Рост тонких пленок на поверхности:

Цель работы: изучить механизмы роста тонких пленок методом компьютерного моделирования и экспериментально исследовать морфологию пленки меди, осажденной на стеклянную подложку.

Физико-химические основы процесса

Рост тонких пленок — это процесс формирования на поверхности подложки (субстрата) слоя другого материала толщиной от нанометров до микрометров. Выделяют три классических механизма роста, определяемых соотношением сил сцепления адтом-адтом и адтом-подложка:

1. Слойной рост (mechanism Франка — ван дер Мерве): происходит, когда взаимодействие адтом-подложка сильнее, чем адтом-адтом. Адтомы полностью смачивают поверхность, образуя послойно заполняющиеся монокристаллические островки.
2. Островковый рост (mechanism Фольмера — Вебера): наблюдается при более сильном взаимодействии адтом-адтом. Адтомы агрегируют в трехмерные островки, которые coalesce (сливаются) по мере роста.
3. Смешанный рост (Странски — Крастанова): Промежуточный механизм, при котором сначала формируется один-два смачивающих монослоя, а затем начинается островковый рост.

Кинетика роста и конечная морфология пленки определяются условиями осаждения: температурой подложки, скоростью поступления пара, давлением в камере.

Экспериментальная методика и оборудование

Методика сочетает компьютерное моделирование для понимания фундаментальных механизмов и экспериментальное осаждение для изучения реальной морфологии. Используемое оборудование:

1. Для моделирования: Персональный компьютер со специализированным ПО (например, специальные симуляторы на основе метода Монте-Карло).
2. Для эксперимента: Установка вакуумного термического напыления, включающая вакуумную систему, испаритель (вольфрамовую спираль с медью), держатель подложек, источник питания; сканирующий электронный микроскоп (СЭМ) или атомно-силовой микроскоп (АСМ). Основные материалы: стеклянные подложки, медная проволока высокой чистоты.

Характеристика анализируемых материалов / получаемых продуктов

1. Подложка: Стекло, аморфный материал с шероховатой на атомарном уровне поверхностью.
2. Тонкая пленка меди: Непрозрачное покрытие с металлическим блеском, структура которого варьируется от островковой до сплошной в зависимости от толщины.
3. Модельные системы: Визуализированные компьютером структуры, иллюстрирующие различные механизмы роста.

Ход работы

Компьютерное моделирование механизмов роста

С использованием программного обеспечения проводят серию simulations осаждения адтомов на идеальную подложку. Моделируют процесс, варьируя ключевые параметры: отношение энергии связи адтом-подложка к энергии связи адтом-адтом и температуру подложки. Наблюдают и фиксируют формирующиеся структуры: смачивающие монослои, двумерные островки или трехмерные кластеры. Идентифицируют преобладающий механизм роста для каждого набора параметров. Анализируют, как температура влияет на подвижность адтомов и, следовательно, на размер и форму островков.

Подготовка подложек и осаждение пленки

Стеклянные подложки тщательно очищают, последовательно промывая в растворах моющих средств, ацетоне и спирте в ультразвуковой ванне для удаления органических и неорганических загрязнений. Высушенные подложки устанавливают в держатель установки напыления. Медную проволоку помещают в испаритель. Систему вакуумируют

до давления порядка 10^{-5} торр. На подложку осаждают пленку меди, пропуская ток через испаритель для её плавления и испарения. Контролируют толщину пленки по времени осаждения при постоянной скорости испарения. Процесс проводят при комнатной температуре подложки.

Анализ морфологии полученной пленки
Полученные образцы с пленкой меди анализируют с помощью СЭМ или АСМ. Исследуют морфологию поверхности при различных увеличениях. Обращают внимание на стадию роста: наблюдают отдельные островки, их слияние (коалесценцию) или формирование сплошной, но, возможно, шероховатой пленки. Измеряют средний размер островков или зерен, оценивают шероховатость поверхности. Сравнивают экспериментально наблюдаемую морфологию с результатами компьютерного моделирования.

Оформление отчета

Отчет по практической работе должен содержать следующие разделы:

1. Титульный лист (название работы, ФИО студента, группа, дата).
2. Цель работы.
3. Теоретическая часть: Классификация механизмов роста тонких пленок, факторы, влияющие на кинетику и морфологию.
4. Экспериментальная часть: Описание методик компьютерного моделирования и экспериментального осаждения пленки.
5. Результаты и расчеты:
 - 1) Результаты моделирования: скриншоты смоделированных структур для разных механизмов роста.
 - 2) Сводная таблица, связывающая параметры моделирования с наблюдаемым механизмом роста.
 - 3) Микрофотографии (СЭМ/АСМ) полученной пленки меди при разных увеличениях.
 - 4) Оценка среднего размера островков/зерен и описание общей морфологии.
6. Выводы: на основе сопоставления данных моделирования и эксперимента формулируются выводы о механизме роста пленки меди на стеклянной подложке при комнатной температуре. Обсуждается, какие факторы (энергия сцепления, подвижность атомов) определили наблюдаемую морфологию.

Практическая работа № 6. Атомные манипуляции на поверхности и формирование наноструктур:

Цель работы: ознакомиться с принципами сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и методами модификации поверхности на примере компьютерного моделирования манипуляций атомами и экспериментального получения нанорельефа на поверхности графита.

Физико-химические основы процесса

Сканирующая туннельная микроскопия (СТМ) основана на регистрации туннельного тока между острой металлической иглой и проводящей поверхностью. Помимо получения атомарно-резолвентных изображений, СТМ позволяет осуществлять направленную модификацию поверхности. Основные методы манипуляции:

1. Вертикальная манипуляция: Игла подводится к атому на расстояние, меньшее равновесного, формируется химическая связь, и атом извлекается из поверхности при отводе иглы.

2. Горизонтальная манипуляция (перетаскивание): Игла располагается сбоку от адтома, и при перемещении иглы атом "перетаскивается" по поверхности за счет сил адгезии.
3. Полевая десорбция: Приложение высокого напряжения между иглой и образцом вызывает десорбцию атомов подложки или адсорбата за счет сильного электрического поля. Эти методы позволяют создавать искусственные наноструктуры (квантовые точки, нанопроволоки) с заданной атомарной архитектурой, что является основой для прототипирования устройств нанoeлектроники и квантовых вычислений.

Экспериментальная методика и оборудование

В связи с высокой сложностью и стоимостью натурального эксперимента, работа сочетает компьютерное моделирование и упрощенный лабораторный эксперимент. Используемое оборудование:

1. *Для моделирования:* Персональный компьютер со специализированным ПО для симуляции СТМ (например, Qute-SPM Simulator) или пакеты молекулярной динамики.
2. *Для эксперимента:* Учебный сканирующий зондовый микроскоп (или атомно-силовой микроскоп - АСМ) с проводящими зондами, образец высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ). Основные материалы: образец ВОПГ, зонды СТМ/АСМ.

Характеристика анализируемых материалов / получаемых продуктов

1. Подложка (ВОПГ): Атомарно-гладкая поверхность с гексагональной решеткой, идеальная для калибровки и демонстрационных экспериментов.
2. Искусственные наноструктуры: Углубления (питты), нанесенные на поверхность, или перемещенные адтомы.
3. Модельные системы: Визуализированные компьютером последовательности манипуляций атомами.

Ход работы

Компьютерное моделирование манипуляций атомами
С использованием программного обеспечения загружают модель кристаллической поверхности (например, Cu(111) или Si(111)). Моделируют процесс сканирования для получения исходного атомарного изображения. Затем выбирают одиночный адтом или атом подложки и проводят серию виртуальных манипуляций: моделируют процесс "перетаскивания" атома по поверхности по заданной траектории (например, для формирования линии из атомов) и процесс вертикального подъема и переноса атома в другую позицию. Фиксируют изменения в силе взаимодействия и туннельном токе во время манипуляций. Анализируют энергетическую выгодность различных позиций для адтома на поверхности.

Экспериментальное получение атомарного изображения и модификация поверхности

Образец графита ВОПГ устанавливают в микроскоп. Проводят калибровку и получают стабильное атомарно-резолвентное изображение гексагональной решетки графита в режиме СТМ или получают изображение рельефа в контактном режиме АСМ. После получения исходного изображения выбирают область для модификации. Увеличивают силу взаимодействия зонда с поверхностью (в АСМ — усиливают силу прижатия, в СТМ — уменьшают зазор/повышают напряжение) и производят несколько сканов в выбранной области для создания нанорельефа

(нанесения царапин или серии углублений). После модификации возвращаются к стандартным параметрам сканирования и получают изображение измененной области, фиксируя созданные наноструктуры.

Анализ

результатов

модификации

Проводят сравнительный анализ СТМ/АСМ изображений до и после модификации поверхности. Для созданных наноструктур (углублений, линий) измеряют их геометрические параметры: ширину, глубину, длину. Оценивают воспроизводимость и точность модификации. Сравнивают экспериментально полученные структуры с результатами компьютерного моделирования, обсуждая сходства и различия, обусловленные реальными условиями (наличие дефектов, тепловые колебания, неидеальность острия зонда).

Оформление отчета

Отчет по практической работе должен содержать следующие разделы:

1. Титульный лист (название работы, ФИО студента, группа, дата).
2. Цель работы.
3. Теоретическая часть: Принципы СТМ, физические основы методов атомных манипуляций (вертикальных и горизонтальных).
4. Экспериментальная часть: Описание методик компьютерного моделирования и проведения эксперимента на СТМ/АСМ.
5. Результаты и расчеты:
 - 1) Скриншоты этапов компьютерного моделирования манипуляций атомами.
 - 2) СТМ/АСМ изображение атомарной решетки графита.
 - 3) СТМ/АСМ изображение области после модификации с созданным нанорельефом.
 - 4) Результаты измерений геометрических параметров созданных наноструктур.
6. Выводы: формулируются выводы о возможностях и ограничениях методов атомных манипуляций, о факторах, влияющих на точность и воспроизводимость формирования наноструктур. Обсуждается потенциал этих методов для нанотехнологий.

Таблица 4. Критерии оценивания практических занятий (№1)

Критерий оценивания	Результат
Задания выполнены в полном объеме. Представлен письменный ответ Выявлены знания компетентности в рамках задания.	6
Задания выполнены частично. Представлен письменный ответ Выявлены частичные знания компетентности в рамках задания.	4
Задания не выполнены. Не представлен письменный ответ Знания компетентности в рамках задания не выявлены.	0

Таблица 4.1. Критерии оценивания практических занятий (№2-6)

Критерий оценивания	Результат
Задания выполнены в полном объеме. Представлен письменный ответ Выявлены знания компетентности в рамках задания.	6

Задания выполнены частично. Представлен письменный ответ Выявлены частичные знания компетентности в рамках задания.	2
Задания не выполнены. Не представлен письменный ответ Знания компетентности в рамках задания не выявлены.	0

Таблица 4.2. Критерии оценивания заданий из вариативной части

№	Вид работ	Min	Max
2.1	Реферат по дисциплине: «Физика поверхности и тонких пленок»	1	5
2.2	Участие в НИРС	10	25
2.3	Участник клуба МиФ	1	10
2.4	Участие в олимпиаде (физика, математика)	5	10
2.4.1	участие	5	5
2.4.2	призер	10	10
2.5	Публикация в индексируемом журнале (совместно с преподавателем)	10	10
2.6	Акселерационная программа/ проект Росмолодежи	20	40
2.6.1	участие	20	20
2.6.2	грант	40	40
	Промежуточная аттестация по дисциплине	0	30
Итого баллов по вариативной части		40	60
Итого баллов по дисциплине			100

Образцы тестовых заданий текущего контроля

ПК-1; ПК-3

- Что такое поверхностная энергия?
 - Энергия, связанная с объемом материала
 - Энергия, связанная с диффузией в объеме
 - Энергия теплового движения частиц
 - Избыточная энергия, возникающая на границе раздела фаз
- Какой метод используется для получения тонких пленок путем осаждения из газовой фазы?
 - Электролитическое осаждение
 - Химическое осаждение из паровой фазы (CVD)
 - Механическое шлифование
 - Лазерная абляция

3. Что характеризует толщину тонкой пленки в нанометровом диапазоне?
 - а) Макроскопические свойства
 - б) Квантовые эффекты и размерные зависимости
 - в) Только оптические свойства
 - г) Только механические свойства
4. Какой тип структуры поверхности описывается моделью Тернера?
 - а) Идеальная плоскость
 - б) Пористая структура
 - в) Ступенчатая поверхность с атомными ступенями
 - г) Amorphousная поверхность
5. Что такое эпитаксия?
 - а) Процесс роста пленки без ориентации на подложку
 - б) Ориентированный рост пленки на кристаллической подложке
 - в) Диффузия атомов в объеме
 - г) Химическое травление поверхности
6. Какое свойство тонких пленок проявляется в эффекте интерференции света?
 - а) Оптическая толщина и отражение
 - б) Электрическая проводимость
 - в) Магнитные свойства
 - г) Теплопроводность
7. Что такое поверхностное натяжение?
 - а) Сила, действующая в объеме жидкости
 - б) Сила на единицу длины границы раздела фаз
 - в) Давление в газовой фазе
 - г) Энергия активации диффузии
8. Какой метод измерения толщины тонких пленок основан на интерферометрии?
 - а) Эллипсометрия
 - б) Рентгеновская дифракция
 - в) Атомно-силовая микроскопия
 - г) Спектроскопия
9. Что такое островковый рост пленки?
 - а) Равномерное осаждение по всей поверхности
 - б) Рост в виде волокон
 - в) Образование отдельных кластеров перед сплошным покрытием
 - г) Диффузионный рост в объеме
10. Как влияет размер частиц в нанопленках на их свойства?
 - а) Не влияет
 - б) Только снижает прочность
 - в) Увеличивает поверхностную энергию и изменяет оптические характеристики
 - г) Увеличивает объемную плотность
11. Что такое адсорбция на поверхности?
 - а) Процесс поглощения в объеме
 - б) Диффузия через пленку
 - в) Испарение с поверхности
 - г) Накопление вещества на поверхности твердого тела

12. Какой тип тонких пленок используется в солнечных батареях?
 - а) Полупроводниковые пленки (например, кремниевые)
 - б) Металлические пленки
 - в) Диэлектрические пленки
 - г) Магнитные пленки
13. Что такое эффект Казимира?
 - а) Электрическое сопротивление пленки
 - б) Квантовый эффект притяжения между проводящими поверхностями
 - в) Оптическое поглощение
 - г) Механическое напряжение
14. Какой метод осаждения тонких пленок включает ионное бомбардирование?
 - а) Магнетронное распыление
 - б) Термическое испарение
 - в) Электрофорез
 - г) Химическое травление
15. Что такое поверхностная диффузия?
 - а) Движение атомов в объеме материала
 - б) Диффузия через границу раздела
 - в) Испарение атомов с поверхности
 - г) Перемещение атомов по поверхности твердого тела

Таблица 4.3. Критерии оценивания тестирования

Критерий	Баллы
Зачтено, более 40 % или равно 40% ответов правильных	10
Не зачтено, менее 40 % ответов правильных	0
Итого	0-10

Примерная тематика рефератов

1. Основные концепции поверхностной энергии и её роль в физике поверхности.
2. Методы осаждения тонких пленок: сравнительный анализ CVD и PVD.
3. Эпитаксия: механизмы и применение в полупроводниках.
4. Оптические свойства тонких пленок и интерференционные эффекты.
5. Электрические и магнитные свойства нанопленок.
6. Механические свойства тонких пленок: напряжения и деформации.
7. Адсорбция на поверхности твердых тел: изотермы и кинетика.
8. Модели поверхности: от идеальных плоскостей к реальным структурам.
9. Применение тонких пленок в солнечных батареях.
10. Тонкие пленки в микроэлектронике: транзисторы и интегральные схемы.
11. Наноматериалы и тонкие пленки: квантовые эффекты и размерные зависимости.
12. Методы характеризации поверхности: AFM, STM и эллипсометрия.
13. Эффект Казимира и квантовые явления в тонких пленках.
14. Биомедицинские применения тонких пленок: импланты и сенсоры.
15. Экологические аспекты: тонкие пленки для очистки воды и воздуха.

Таблица 4.4 Критерии оценивания реферата

Критерий оценивания	Результат
Содержание реферата соответствует заявленной в названии тематике; реферат оформлен в соответствии с общими требованиями написания и техническими требованиями оформления реферата; реферат имеет чёткую композицию и структуру; в тексте реферата отсутствуют логические нарушения в представлении материала; корректно оформлены и в полном объёме представлены список использованной литературы и ссылки на использованную литературу в тексте реферата; реферат представляет собой самостоятельное исследование, представлен качественный анализ найденного материала, отсутствуют факты плагиата.	5 баллов
Содержание реферата соответствует заявленной в названии тематике; реферат оформлен в соответствии с общими требованиями написания реферата, но есть погрешности в техническом оформлении; реферат имеет чёткую композицию и структуру; в тексте реферата отсутствуют логические нарушения в представлении материала; в полном объёме представлены список использованной литературы, но есть ошибки в оформлении; реферат представляет собой самостоятельное исследование, представлен качественный анализ найденного материала, отсутствуют факты плагиата.	4 балла
Содержание реферата соответствует заявленной в названии тематике; в целом реферат оформлен в соответствии с общими требованиями написания реферата, но есть погрешности в техническом оформлении; в целом реферат имеет чёткую композицию и структуру, но в тексте реферата есть логические нарушения в представлении материала; в полном объёме представлен список использованной литературы, но есть ошибки в оформлении; некорректно оформлены или не в полном объёме представлены ссылки на использованную литературу в тексте реферата; в целом реферат представляет собой самостоятельное исследование, представлен анализ найденного материала, отсутствуют факты плагиата.	3 балла
Содержание реферата соответствует заявленной в названии тематике; в реферате отмечены нарушения общих требований написания реферата; есть погрешности в техническом оформлении; в целом реферат имеет чёткую композицию и структуру, но в тексте реферата есть логические нарушения в представлении материала; в полном объёме представлен список использованной литературы, но есть ошибки в оформлении; некорректно оформлены или не в полном объёме представлены ссылки на использованную литературу в тексте реферата; в целом реферат представляет собой достаточно самостоятельное исследование, представлен анализ найденного материала, присутствуют единичные случаи фактов плагиата.	2 балла

5. Содержание оценочных средств промежуточной аттестации

Форма промежуточной аттестации по дисциплине – экзамен

Форма проведения экзамена: устный ответ на два вопроса в билете

Перечень вопросов и критерии оценивания ответов на вопросы в билете по темам дисциплины.

Перечень вопросов для подготовки к экзамену:

Критерии: ПК-1

1. Кристаллическая структура твердого тела. Решетки Браве. Индексы Миллера. Пример простого кристалла.
2. Атомная структура чистых поверхностей: Релаксация и реконструкция. Модель террас-ступеней-изломов. Дефекты на поверхности.
3. Явление адсорбции. Физосорбция и хемосорбция. Кинетика адсорбции.
4. Явление десорбции. Кинетика десорбции.
5. Объёмная диффузия вблизи поверхности: Механизмы диффузии. Первый закон Фика.
6. Виды эмиссии электронов и работа выхода.
7. Механизмы роста тонких плёнок.
8. Механизмы роста гетероэпитаксиальных пленок.

Критерии: ПК-3

1. Принцип метода молекулярно-лучевой эпитаксии.
2. Методы осаждения тонких плёнок из паровой фазы.
3. Атомные манипуляции с помощью СТМ для формирования наноструктур.
4. Сканирующая электронная микроскопия. Принцип метода и его возможности.
5. Сканирующая туннельная микроскопия. Принцип метода и его возможности.
6. Атомно-силовая микроскопия. Принцип метода и его возможности.
7. Электронная спектроскопия. Методы и возможности.
8. Ионная спектроскопия. Методы и возможности

Таблица 5. Критерии оценивания промежуточной аттестации в форме экзамена

Критерий оценивания	Баллы
Обучающийся ответил на два вопроса в билете. Продemonстрировал знания по формируемым компетенциям в полном объеме (приводились доводы и объяснения). Знания освоения компетенций выявлены.	30 баллов
Обучающийся ответил на один вопрос в билете. Продemonстрировал знания по формируемым компетенциям частично. Постиг смысл изучаемого материала (может высказать вербально, четко и ясно, или конструировать новый смысл, новую позицию). Знания освоения компетенций выявлены частично.	15 баллов
Обучающийся не ответил на вопросы в билете. Не может согласовать свою позицию или действия относительно обсуждаемой тематики. Знания освоения компетенций не выявлены.	0