

**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
ПК-1. Способен использовать специализированные знания о выбранных объектах исследований для проведения научных исследований с использованием современных информационных технологий	<p>Знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– физическую сущность явлений, протекающих на поверхности твердого тела, основы формирования наноразмерных структур</li> </ul> <p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– выполнять количественные оценки величины эффектов и характеристических параметров с учётом особенностей кристаллической структуры, электронного и фононного спектров, типа и концентрации примесей</li> </ul>	<p>Задания практико-ориентированного уровня: Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>
ПК-1.1. Применяет специальные знания для исследования структуры и свойств новых материалов	<p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– навыками решения задач физики поверхности, анализа физического смысла полученных решений</li> </ul>	<p>Задания практико-ориентированного уровня: Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>
ПК-3. Способен к анализу проблемы, постановке цели научного исследования, выбору средств ее достижения	<p>Знает:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– принципы и общую методику физического эксперимента с использованием установок для исследования структуры, состава и физических свойств поверхности и тонких пленок;</li> </ul>	<p>Задания практико-ориентированного уровня: Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>
ПК-3.1. Критически анализирует современные проблемы в избранной области исследований	<p>Умеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– выбирать методы и типы оборудования для получения информации о составе и структуре поверхности материалов</li> </ul>	<p>Задания практико-ориентированного уровня: Практические работы № 1,2,3,4,5,6</p>
	<p>Владеет:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– навыками сравнительного анализа полученных результатов у различных исследователей</li> </ul>	<p>Задания практико-ориентированного уровня: 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
<b>ИТОГО</b>	<b>0-100</b>

**Таблица 3.1. Распределение баллов по текущему контролю**

№	Вид работ	Min	Max
<b>1. Обязательная часть</b>			
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
<b>Итого баллов по обязательной части</b>		<b>20</b>	<b>40</b>
<b>2. Вариативная часть</b>			
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 (нижняя – триклиническая, 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  $60^\circ$ . 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 °C 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 наблюдавшихся 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<sub>3</sub> 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

Пластину 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 обезжирают.

**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 наблюданной 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 тунNELьная 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). Странят 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. Слоевой рост (mechanism Франка — ван дер Мерве): происходит, когда взаимодействие адтом-подложка сильнее, чем адтом-адтом. Адтомы полностью смачивают поверхность, образуя послойно заполняющиеся моноатомные 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 адтомов) 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-резолвенных изображений, СТМ позволяет осуществлять направленную модификацию поверхности. Основные методы манипуляций:

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 адтом "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 наноэлектроники и квантовых вычислений.

#### **Экспериментальная методика и оборудование**

В связи с высокой сложностью и стоимостью натурного 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 (пинты), нанесенные на поверхность, или перемещенные адтомы.
3. Модельные системы: Визуализированные компьютером последовательности манипуляций адтомами.

#### **Ход работы**

Компьютерное моделирование манипуляций адтомами

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 адтом подложки и проводят серию виртуальных манипуляций: моделируют процесс "перетаскивания" адтума по поверхности по заданной траектории (например, для формирования линии из адтомов) и процесс вертикального подъема и переноса адтума в другую позицию. Фиксируют изменения в силе взаимодействия и туннельном токе во время манипуляций. Анализируют энергетическую выгодность различных позиций для адтума на поверхности.

Экспериментальное получение атомарного изображения и модификация поверхности

Образец графита ВОПГ устанавливают в микроскоп. Проводят калибровку и получают стабильное атомарно-резолвенное 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.	6
Представлен письменный ответ	
Выявлены знания компетентности в рамках задания.	
Задания выполнены частично.	4
Представлен письменный ответ	
Выявлены частичные знания компетентности в рамках задания.	
Задания не выполнены.	0
Не представлен письменный ответ	
Знания компетентности в рамках задания не выявлены.	

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

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

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

1. Что такое поверхностная энергия?
  - а) Энергия, связанная с объемом материала
  - б) Энергия, связанная с диффузией в объеме
  - г) Энергия теплового движения частиц
  - г) Избыточная энергия, возникающая на границе раздела фаз
2. Какой метод используется для получения тонких пленок путем осаждения из газовой фазы?
  - а) Электролитическое осаждение
  - б) Химическое осаждение из паровой фазы (CVD)
  - в) Механическое шлифование
  - г) 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) Аморфная 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?
- Полупроводниковые пленки (например, кремниевые)
  - Металлические пленки
  - Диэлектрические пленки
  - Магнитные пленки
13. Что такое эффект Казимира?
- Электрическое сопротивление пленки
  - Квантовый эффект притяжения между проводящими поверхностями
  - Оптическое поглощение
  - Механическое напряжение
14. Какой метод осаждения тонких пленок включает ионное бомбардирование?
- Магнетронное распыление
  - Термическое испарение
  - Электрофорез
  - Химическое травление
15. Что такое поверхностная диффузия?
- Движение атомов в объеме материала
  - Диффузия через границу раздела
  - Испарение атомов с поверхности
  - Перемещение атомов по поверхности твердого тела

**Таблица 4.3. Критерии оценивания тестирования**

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

### **Примерная тематика рефератов**

- Основные концепции поверхностной энергии и её роль в физике поверхности.
- Методы осаждения тонких пленок: сравнительный анализ CVD и PVD.
- Эпитаксия: механизмы и применение в полупроводниках.
- Оптические свойства тонких пленок и интерференционные эффекты.
- Электрические и магнитные свойства нанопленок.
- Механические свойства тонких пленок: напряжения и деформации.
- Адсорбция на поверхности твердых тел: изотермы и кинетика.
- Модели поверхности: от идеальных плоскостей к реальным структурам.
- Применение тонких пленок в солнечных батареях.
- Тонкие пленки в микроэлектронике: транзисторы и интегральные схемы.
- Наноматериалы и тонкие пленки: квантовые эффекты и размерные зависимости.
- Методы характеризации поверхности: AFM, STM и эллипсометрия.
- Эффект Казимира и квантовые явления в тонких пленках.
- Биомедицинские применения тонких пленок: имплантаты и сенсоры.
- 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 plagiarism.	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 plagiarism.	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 plagiarism.	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 plagiarism.	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 формированияnanoструктур.
4. Сканирующая электронная микроскопия. Принцип метода и его возможности.
5. Сканирующая тунNELьная 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. Продемонстрировал знания по формируемым компетенциям в полном объеме (приводились доводы и объяснения). Знания освоения компетенций выявлены.	30 баллов
Обучающийся ответил на один вопрос в билете. Продемонстрировал 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