

# КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет  
(назва факультету)

Кафедра фізики металів



## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ<sup>1</sup>

Електронна спектроскопія твердого тіла

(повна назва навчальної дисципліни)

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки  
спеціальність 104 Фізика та астрономія  
освітній ступінь Бакалавр  
освітня програма Фізика  
спеціалізований  
вибірковий блок Фізика металів  
вид дисципліни Вибіркова ВК15

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	восьмий
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	<u>залік</u>

Викладачі: доцент Плющай Інна Вячеславівна

(Науково-педагогічні працівники, які забезпечують викладання даної дисципліни у відповідному навчальному році)

Пролонговано: на 2022/2023 н.р.  «20» 02 2022 р.  
(підпис, ПІБ, дата)

на 20\_\_/20\_\_ н.р. (\_\_\_\_\_) «\_\_» 20\_\_ р.  
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2021

<sup>1</sup> Робоча програма навчальної дисципліни є нормативним документом вищого навчального закладу і містить виклад конкретного змісту навчальної дисципліни, послідовність, організаційні форми її вивчення та їх обсяг, визначає форми та засоби поточного і підсумкового контролю.

Розробники<sup>2</sup>: Плющай Інна Вячеславівна, кандидат фіз.-мат. наук, доцент, доцент кафедри фізики металів (вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕНО  
Зав. кафедри фізики металів

  
(підпис)

(Курилюк В.В.)  
(прізвище та ініціали)

Протокол № 11 від «10» червня 2021 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 4 від «22» червня 2021 року

Голова науково-методичної комісії  
(підпис)



(Оліх О.Я.)

<sup>2</sup> Розробляється лектором. Робоча програма навчальної дисципліни розглядається на засіданні кафедри (циклової комісії – для коледжів), науково-методичної комісії факультету/інституту (раді навчального закладу - коледжу), підписується завідувачем кафедри (головою циклової комісії), головою науково-методичної комісії факультету/інституту (головою ради) і затверджується заступником декана/директора інституту з навчальної роботи (заступником директора коледжу).

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – отримання систематичних знань в галузі електронної спектроскопії, зокрема, в області аналізу хімічного складу речовини, електронної структури поверхні та об'єму твердих тіл, розподілу заповнених і незаповнених енергетичних поверхневих станів, ступеня окислення та хімічної активності поверхні, засвоєння теоретичних засад методів електронної спектроскопії та оволодіння методологією і особливостями їх застосування, набуття практичних навичок отримання та розшифровки спектрів поглинання, пропускання і відбивання та спектральних характеристик досліджуваних об'єктів.

### **2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:**

При вивченні даного курсу використовуються знання та вміння, набуті студентами при вивченні курсів математичного аналізу, загальної фізики, електродинаміки та квантової механіки, а також курсу « Структурна кристалографія».

**3. Анотація навчальної дисципліни / референс:** В рамках курсу «Електронна спектроскопія твердого тіла» розглядаються сучасні уявлення про атомно-електронну будову речовини та конкретних функціональних матеріалів, основні поняття електронної спектроскопії твердого тіла, основи математичного забезпечення досліджень, властивості та області застосування експериментальних методів, фізичні принципи процесів, що відбуваються у твердому тілі при взаємодії з рентгенівським випроміненням, класифікацію електронних та рентгенівських спектрів твердих тіл, фізичні принципи енергоаналізу електронів та класифікацію методів діагностики поверхні твердих тіл, основні методи досліджень, що використовуються в електронній спектроскопії.

Курс побудовано за модульною системою. Перший модуль розкриває теоретичні основи електронної спектроскопії на базі яких у другій частині курсу відбувається вивчення основ наступних спектральних методів - рентгенівська фотоелектронна спектроскопія, ультрафіолетова фотоелектронна спектроскопія, рентгенівська емісійна спектроскопія, Оже-електронна спектроскопія, EXAFS-спектроскопія, XANES-спектроскопія, тунельна спектроскопія.

Навчальна задача курсу після засвоєння матеріалу полягає в умінні самостійно працювати з науковою апаратурою та програмним забезпеченням досліджень, вибирати оптимальні для проведення досліджень експериментальні методи та засоби обчислювальної техніки на основі порівняльного аналізу та функціональних і експлуатаційних характеристик, самостійно отримувати та аналізувати експериментальні дані.

Методи викладання: лекції. Методи оцінювання: модульні контрольні роботи після основних розділів спецкурсу, залік. Підсумкова оцінка виставляється на основі проміжних оцінок (60%) та заліку (40%).

**4. Завдання (навчальні цілі)** – освоєння студентами спектральних методів дослідження речовини, зокрема, - рентгенівської фотоелектронної спектроскопії, ультрафіолетової фотоелектронної спектроскопії, рентгенівської емісійної спектроскопії, Оже-електронної спектроскопії, EXAFS-спектроскопії, XANES-спектроскопії, тунельної спектроскопії.

Згідно вимог Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 104 «Фізика та астрономія», ОПП "Фізика", спеціалізований вибірковий блок «Фізика металів»), дисципліна забезпечує набуття здобувачами освіти наступних компетентностей:

*інтегральної:*

Здатність розв'язувати складні спеціалізовані задачі та практичні проблеми з фізики та/або астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та/або астрономії і характеризується комплексністю та невизначеністю умов.

загальних:

- ЗК1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
- ЗК2. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
- ЗК3. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.
- ЗК7. Навички здійснення безпечної діяльності.

фахових:

ФК1. Знання і розуміння теоретичного та експериментального базису сучасної фізики та астрономії.

ФК2. Здатність використовувати на практиці базові знання з математики як математичного апарату фізики і астрономії при вивченні та дослідженні фізичних та астрономічних явищ і процесів.

ФК7. Здатність використовувати базові знання з фізики та астрономії для розуміння будови та поведінки природних і штучних об'єктів, законів існування та еволюції Всесвіту.

**5. Результати навчання за дисципліною:** (описуються з детальною достовірністю для розробки заходів оцінювання)

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація*; 4. автономність та відповідальність*)		Методи викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Оволодіння основами теорії процесу розсіювання для опису ймовірностей квантових переходів.	лекції	Модульна контрольна робота	30
2.1	Оволодіння сучасними експериментальними методами дослідження та опису електронної та атомної будови речовин.	лекції	Модульна контрольна робота	30

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання** (необов'язково для вибіркового дисциплін)

Результати навчання дисципліни	1.1	2.1
<b>Програмні результати навчання</b>		
ПРН1. Знати, розуміти та вміти застосовувати основні положення загальної та теоретичної фізики, зокрема, класичної, релятивістської та квантової механіки, молекулярної фізики та термодинаміки, електромагнетизму, хвильової та квантової оптики, фізики атома та атомного ядра для встановлення, аналізу, тлумачення, пояснення й класифікації суті та механізмів різноманітних 8 фізичних явищ і процесів для розв'язування складних спеціалізованих задач та практичних проблем з фізики та/або астрономії.	+	+
ПРН3. Знати і розуміти експериментальні основи фізики: аналізувати, описувати, тлумачити та пояснювати основні експериментальні підтвердження існуючих фізичних теорій.		+

**7. Схема формування оцінки.**

**7.1 Форми оцінювання студентів:**

\* заповнюється за необхідністю, наприклад для практик, лабораторних курсів тощо.

**- семестрове оцінювання:**

1. Модульна контрольна робота 1 за темами 1-5: РН 1.1 – 30 балів / 18 балів

2. Модульна контрольна робота 2 за темами 6-10: РН 1.2 – 30 балів / 18 балів

**- підсумкове оцінювання у формі заліку.**

Залік проводиться в письмовій формі. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом під час заліку дорівнює 40. Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за залік не може бути меншою 24 балів. Студент не допускається до заліку, якщо під час семестру набрав менше ніж 36 балів.

**7.2. Організація оцінювання:**

Модульні контрольні роботи 1 - 2 проводяться по завершенні тематичних лекцій з Розділу 1, 2 відповідно.

Опитування в процесі лекцій проводиться упродовж семестру.

**7.3. Шкала відповідності оцінок**

<b>Зараховано / Passed</b>	<b>60-100</b>
<b>Не зараховано / Fail</b>	<b>0-59</b>

## 8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

### ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	Самостійна робота
<b>Розділ 1. Теоретичні основи електронної та атомної будови твердих тіл</b>				
1	<p><b>Тема 1. Вступ. Основи теорії процесу фотопоглинання. Рентгенівські спектри та електронна структура молекул і твердих тіл.</b></p> <p>Взаємодія випромінювання з речовиною. Стаціонарний та нестационарний опис процесу фотопоглинання. Класифікація методів діагностики поверхні твердих тіл. Електронна спектроскопія, її значення у дослідженні твердих тіл. Фізичні принципи енергоаналізу електронів. Рентгенівське випромінювання. Рентгенівські спектри молекул. Роздільна здатність різних методів дослідження.</p> <p>Завдання для самостійної роботи.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Вивчення матеріалу лекції.</li> <li>2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.</li> </ol> <p>Література [1,2,3,8].</p>	4		7
2	<p><b>Тема 2. Рентгеноелектронна спектроскопія та її застосування для дослідження твердих тіл.</b></p> <p>Фізичні основи та етапи розвитку методу. Основне рівняння фотоефекту. Фотоелектронні спектри. Основні закономірності у рентгеноелектронних спектрах. Фотоемісія при впливі УФ та рентгенівського випромінювання. Ймовірність виходу фотоелектронів. Основні методи фотоелектронної спектроскопії. Методи фотоелектронної та ультрафіолетової електронної спектроскопії. Експериментальна техніка.</p> <p>Завдання для самостійної роботи.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Вивчення матеріалу лекції.</li> <li>2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.</li> </ol> <p>Література [1,2,3,8].</p>	4		7
3	<p><b>Тема 3. Рентгенівські емісійні спектри.</b></p> <p>Характеристичне рентгенівське випромінювання. Форма, ширина та інтенсивність рентгенівського спектра. Застосування наближення «заморожених» орбіталей при інтерпретації рентгенівських емісійних спектрів. Урахування впливу спотворення орбіталей при утворенні рентгенівської дірки. Хімічні зсуви рентгенівських внутрішніх ліній. Мультиплетна структура рентгенівських емісійних ліній. Зонна рентгенівська емісія. Фрагментарність рентгенівських спектрів.</p> <p>Завдання для самостійної роботи.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Вивчення матеріалу лекції.</li> <li>2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.</li> </ol> <p>Література [1,2,3,5,8].</p>	4		7
4	<p><b>Тема 4. Оже-електронна спектроскопія – метод дослідження електронної структури.</b></p> <p>Фізичні основи методу. Енергія оже-електронів. Фактори, що впливають на вихід оже-електронів. Перегин іонізації внутрішнього рівня. Ймовірність оже-процесу. Середня довжина вільного пробігу електронів. Швидкі обернено-розсіяні електрони. Хімічні зсуви. Кількісна оже-спектроскопія. Основне рівняння оже-спектроскопії. Метод зовнішніх еталонів. Метод, що використовує коефіцієнти елементної чутливості.</p>	4		8

	<p>Спеціальні методи для вивчення тонкошарових структур. Абсолютна чутливість методики оже-спектроскопії. Застосування спектрів <math>N(E)</math> та <math>dN/dE</math>. Виключення фону.</p> <p>Завдання для самостійної роботи.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Вивчення матеріалу лекції.</li> <li>2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.</li> </ol> <p>Література [2,6,7,8].</p>			
5	<p><b>Тема 5. Аналіз рентгенівських спектрів.</b></p> <p>Аналіз рентгенівських фотоелектронних спектрів. Аналіз рентгенівських емісійних спектрів. Аналіз оже-спектрів.</p> <p>Завдання для самостійної роботи .</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Вивчення матеріалу лекції.</li> <li>2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.</li> </ol> <p>Література [1,2,3,8].</p>	4		7
	<b>Модульна контрольна робота</b>			2
<b>Розділ 2. Експериментальні методи досліджень атомної та електронної будови неупорядкованих систем .</b>				
6	<p><b>Тема 6. Атомні функцію розподілу.</b></p> <p>Основні закономірності атомних функцій розподілу електронної густини.</p> <p>Завдання для самостійної роботи.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Вивчення матеріалу лекції.</li> <li>2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.</li> </ol> <p>Література [3]</p>	2		8
7	<p><b>Тема 7 Рентгенівська спектроскопія поглинання. EXAFS-спектроскопія.</b></p> <p>Рентгенівська спектроскопія поглинання - потужний метод дослідження речовини. Взаємодія випромінювання з речовиною. Переріз фотопоглинання. Основи теорії EXAFS. Теоретичний опис дальньої тонкої структури рентгенівських спектрів поглинання рівняння. EXAFS в наближенні однократного розсіювання. Вплив багатоелектронних ефектів на EXAFS. Фази та амплітуди розсіювання. Ефекти багатократного розсіювання. Синхротронне випромінювання. Кінематична схема спектрометра. Способи реєстрації. Фур'є аналіз EXAFS-спектрів. Метод моделювання EXAFS-спектрів. Трасферабельність фактору фазового зсуву та амплітуди розсіювання. Проблема <math>E_0</math>. Фактор Дебая-Валлера. Фактор багатократного розсіювання.</p> <p>Завдання для самостійної роботи.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Вивчення матеріалу лекції.</li> <li>2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.</li> </ol> <p>Література [1,4,8]</p>	4		8
8	<p><b>Тема 8. XANES-спектроскопія.</b></p> <p>Прості моделі рентгенівського поглинання вільного атома. Головний край рентгенівського поглинання вільного атома. Рентгенівський <math>K</math>-край поглинання газоподібного аргону. Молекулярна модель поглинання. Зонне поглинання. Рентгенівський екситон. Моделі рентгенівського поглинання, що засновані на теорії розсіяння. Рентгенівські резонанси.</p> <p>Завдання для самостійної роботи.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Вивчення матеріалу лекції.</li> <li>2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.</li> </ol>	4		8

	Література [8]			
9	<p><b>Тема 9. Тунельна спектроскопія .</b>  Принцип роботи скануючого зондового мікроскопу. Види зондів. Сканери. Система зворотного зв'язку. Комп'ютер керування та обробки даних. Тунельний сенсор. Зонна діаграма тунельного контакту двох провідників. Рівняння для тунельного струму. Принципи роботи тунельного сенсора. Режими сканування. Режими постійного струму та постійної висоти. Вольт-амперна характеристика тунельного контакту. Сканувальна тунельна спектроскопія. Режими модуляції напруги (V-modulation) та висоти (Z-modulation).  Завдання для самостійної роботи .  1. Вивчення матеріалу лекції.  2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.  Література [8-11]</p>	4		8
10	<p><b>Тема 10. Аналіз спектральних характеристик.</b>  Підготовка поверхні твердих тіл для досліджень. Методи візуалізації СЗМ зображень. Кольорова шкала висот. Профілометрія. Побудова тривимірних зображень. Використання ефекта бічного підсвічування. Методи вирівнювання СЗМ зображень. Статистичний аналіз СЗМ даних. Побудова та обробка гістограм розподілу висот. Методи цифрової фільтрації СЗМ зображень. Смугові фільтри. Конволюційні фільтри. Фур'є-аналіз та фільтрація СЗМ зображень. Вияв та аналіз зернистої структури зображення поверхні досліджуваних зразків.  Завдання для самостійної роботи.  1. Вивчення матеріалу лекції.  2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.  Література [5]</p>	4		8
11	<p><b>Тема 11. Спектроскопія розсіювання фотонів та нейтронів.</b>  Огляд основних методів спектроскопії розсіювання фотонів та нейтронів та їх застосування у дослідженні властивостей та будови твердих тіл.  Завдання для самостійної роботи.  1. Вивчення матеріалу лекції.  2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.  Література [9]</p>	2		
	<b>Модульна контрольна робота</b>			2
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>40</b>		<b>80</b>

Примітка: слід зазначити теми, винесені на самостійне вивчення

**Загальний обсяг 120 год.<sup>3</sup>, в тому числі:**

Лекцій – **40 год.**

Семінари – **0 год.**

Практичні заняття – **0 год.**

Лабораторні заняття – **0 год.**

Тренінги – **0 год.**

Консультації – **0 год.**

Самостійна робота – **80 год.**

<sup>3</sup> Загальна кількість годин, відведених на дану дисципліну згідно навчального плану.



## 9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

### *а) основна*

1. Карбовский В.Л., Шпак А.П. Рентгеновская и электронная спектроскопия. –К. Наукова думка, 2010, 264 с.
2. Загородній В.В. Локальні методи досліджень: підручник для студентів спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» ; КПІ ім. Ігоря Сікорського.– Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019, 323 с.
3. Немошкаленко В.В., Алешин В.Г. Электронная спектроскопия кристаллов. – Киев: Наук. думка, 1983. – 283 с.
4. Якунов А.В. Техніка та методи спектральних досліджень: Методичні вказівки до лабораторних робіт для студентів фізичного факультету. – К.: ВПЦ «Київський університет», 2007. – 35 с.
5. Рентгеноспектральный метод изучения структуры аморфных тел: EXAFS – спектроскопия / Д.И. Кочубей, Ю.А. Бабанов, К.И. Замараев и др. – Новосибирск.: Наука, Сиб.отд., 1988. – 306 с.
6. Немошкаленко В.В. Рентгеновская эмиссионная спектроскопия металлов и сплавов. – К.: Наукова думка, 1972. – 318 с.
7. Немошкаленко В.В., Алешин В.Г. Теоретические основы рентгеновской эмиссионной спектроскопии. – К.: Наукова думка, 1974. – 382 с.
8. Photon and Neutron Scattering Spectroscopy and Its Applications in Condensed Matter (MIT open courses) <https://ocw.mit.edu/courses/nuclear-engineering/22-903-photon-and-neutron-scattering-spectroscopy-and-its-applications-in-condensed-matter-spring-2005/>

### *б) додаткова*

1. Сучасні методи дослідження структури матеріалів. Ч. I. Фізика рентгенівських променів / Шпак А.П., Карбівський В.Л., Куницький Ю.А., Пошелюжний О.М. – К.: Академперіодика, 2001. – 103 с.
2. Акустико-емісійні методи дослідження у фізиці твердого тіла. Ляшенко О.В., Киселюк М.П., Велещук В.П., Власенко О.І. К.: ВПЦ “Київський університет”, 2011. – 82 с.
3. Шкумат А.П. Електронна спектроскопія в хімічних дослідженнях та в хімічному матеріалознавстві. Лабораторний практикум : навчальний посібник / А. П. Шкумат. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2015. – 168 с.
4. В.Л. Миронов. Основы сканирующей зондовой микроскопии // РАН ИФМ, г. Нижний Новгород, 2004. – 110с.
5. В.К.Неволин. Физические основы туннельно-зондовой нанотехнологии / М.: Мир. 2004. 100 с.
6. X-ray Photoelectron Spectroscopy <https://www.elettra.eu/lightsources/labs-and-services/surface-lab/x-ray-photoelectron-spectroscopy.html>
7. X-ray Photoelectron Spectroscopy - XPS International <https://www.xpsdata.com/>
8. Photoemission spectroscopy [https://en.wikipedia.org/wiki/Photoemission\\_spectroscopy](https://en.wikipedia.org/wiki/Photoemission_spectroscopy)
9. Reinert, Friedrich; Hüfner, Stefan (2005). "Photoemission spectroscopy—from early days to recent applications". *New Journal of Physics*. 7 (1): 97. doi:10.1088/1367-2630/7/1/097.
10. Electronic Spectroscopy and Photochemistry (MIT) <https://ocw.mit.edu/courses/chemistry/5-61-physical-chemistry-fall-2017/lecture-videos/electronic-spectroscopy-and-photochemistry/>