

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра фізики металів



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Електронна спектроскопія твердого тіла

для студентів

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

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2025/2026
Семестр	восьмий
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладачі: доцент Плющай Інна Вячеславівна

Пролонговано: на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2025

Розробники: Плющай Інна Вячеславівна, канд. фіз.-мат. наук, доцент, доцент кафедри фізики металів

(вказати авторів: ПІБ, науковий ступінь, вчене звання, посада, кафедра)

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізики металів


(підпис)

(Василь КУРИЛЮК)

Протокол № 12 від «22» травня 2025 р.

Схвалено науково-методичною комісією фізичного факультету

Протокол від «23» червня 2025 року № 11

Голова науково-методичної комісії


(підпис)

(Олег ОЛІХ)

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 випромінюванням, 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.

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 астрономії у професійній діяльності або у процесі подальшого навчання, що передбачає застосування певних теорій і методів фізики та 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.

спеціальних (фахових, предметних):

- 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)

<i>Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)</i>		<i>Методи викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
Код	Результат навчання			
1.1	Знати та розуміти основні поняття процесу розсіювання випромінювання речовиною; класифікацію методів діагностики поверхні твердих тіл та фізичні принципи енергоаналізу електронів; теоретичні основи рентгенівських спектрів молекул і твердих тіл.; фізичні основи та принципи роботи методів фотоелектронної спектроскопії: рентгеноелектронна спектроскопія (XPS), ультрафіолетова фотоелектронна спектроскопія (UPS); основне рівняння фотоефекту, ймовірність виходу фотоелектронів, закономірності фотоелектронних спектрів; методику експериментальних досліджень та інтерпретації отриманих результатів.	<i>Лекції Самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік</i>	20
1.2	Знати та розуміти фізичні основи рентгенівської емісійної спектроскопії; основи Оже-електронної спектроскопії; теоретичні основи рентгенівської спектроскопії поглинання: EXAFS-спектроскопія (дальня тонка структура спектрів поглинання); основи тунельної спектроскопії: принцип роботи скануючого зондового мікроскопу, режими модуляції напруги (V-modulation) та висоти (Z-modulation).	<i>Лекції Самостійна робота</i>	<i>Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік</i>	20
2.1	Вміти вільно володіти загальнонавчаними термінами електронної спектроскопії твердого тіла: фотоефект, фотоелектронний спектр, оже-електрон, рентгенівська емісія, EXAFS, XANES, тунельний струм, переріз фотопоглинання, хімічний зсув, характеристичне випромінювання, синхротронне випромінювання, скануючий зондовий мікроскоп тощо.	<i>Лекції Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік</i>	20
2.2	Вміти знаходити у довідниковій та науковій літературі відповідні параметри, що характеризують спектральні властивості твердих тіл, наприклад: енергії зв'язку електронів на різних оболонках, характеристичні енергії рентгенівського випромінювання, оже-енергії, роботу виходу, середню довжину вільного пробігу електронів, коефіцієнти	<i>Лекції Самостійна робота</i>	<i>Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік</i>	10

	елементної чутливості для різних методів спектроскопії тощо.			
2.3	Вміти обирати оптимальний метод електронної спектроскопії для вирішення конкретної дослідницької задачі на основі аналізу переваг та обмежень кожного методу (глибина аналізу, роздільна здатність, чутливість, область застосування); розуміти можливості та обмеження експериментальної техніки.	Лекції Самостійна робота	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік	10
2.4	Вміти знаходити та використовувати відповідний теоретичний матеріал для пояснення експериментальних результатів спектроскопічних досліджень, отриманих при виконанні кваліфікаційних робіт; встановлювати зв'язок між спектральними характеристиками та електронною і атомною структурою досліджуваних матеріалів.	Лекції Самостійна робота	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік	10
3.1	Демонструвати спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією, ведення професійної наукової дискусії з питань електронної спектроскопії та її застосування для дослідження властивостей твердих тіл; вміння обґрунтовувати вибір методу дослідження та інтерпретацію отриманих результатів.;	Лекції Самостійна робота	Опитування в процесі лекції, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік	5
3.2	Письмово відображувати та презентувати результати своїх досліджень українською мовою.	Лекції Самостійна робота	Модульна контрольна робота, перевірка рефератів та інших форм самостійної роботи, залік	5

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

Результати навчання дисципліни Програмні результати навчання	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	3.2
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 астрономії.								
ПРНЗ. 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:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота: РН 1.1, 2.1-3.1 - 30 балів / 15 балів

2. Захист реферату 1: РН 1.1, 2.1-2.4, 3.2 - 10 балів / 5 балів

3. Захист звітів реферату 2: РН 1.2, 2.1-2.4, 3.2 - 10 балів / 5 балів

4. Підсумкова модульна контрольна робота: РН 1.1-3.2 - 50 балів / 25 балів

- підсумкове оцінювання у формі заліку

Підсумкова оцінка з освітнього компонента, підсумковою формою контролю за яким встановлено залік, визначається як сума оцінок (балів) за всіма успішно оціненими результатами навчання. Оцінки нижче мінімального порогового рівня до підсумкової оцінки не додаються.

Обов'язковим для отримання позитивної підсумкової оцінки (60 балів і вище та «зараховано») є здача двох рефератів та написання модульних контрольних робіт.

Перескладання семестрового контролю з метою покращення позитивної оцінки не допускається.

7.2. Організація оцінювання:

Модульна контрольна робота 1 проводиться по завершенні тематичних лекцій з Розділу 1.

Захист рефератів 1-2 проводиться упродовж семестру.

Підсумкова модульна контрольна робота проводиться наприкінці семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Зараховано / Passed	60-100
Не зараховано / Fail	0-59

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	Самостійна робота
Розділ 1. Теоретичні основи електронної та атомної будови твердих тіл				
1	Тема 1. Вступ. Основи теорії процесу фотопоглинання. Рентгенівські спектри та електронна структура молекул і твердих тіл. Взаємодія випромінювання з речовиною. Стационарний 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. Завдання для самостійної роботи. 1. Вивчення матеріалу лекції. 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.	4		7
2	Тема 2. Рентгеноелектронна спектроскопія та її застосування для дослідження твердих тіл. Фізичні основи та етапи розвитку методу. Основне рівняння фотоефекту. Фотоелектронні спектри. Основні закономірності у рентгеноелектронних спектрах. Фотоemisія при впливі УФ та рентгенівського випромінювання. Ймовірність виходу фотоелектронів. Основні методи фотоелектронної спектроскопії. Методи фотоелектронної та ультрафіолетової електронної спектроскопії. Експериментальна техніка. Завдання для самостійної роботи. 1. Вивчення матеріалу лекції. 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.	4		7
3	Тема 3. Рентгенівські емісійні спектри. 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. Завдання для самостійної роботи. 1. Вивчення матеріалу лекції. 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.	4		7
4	Тема 4. Оже-електронна спектроскопія – метод дослідження електронної структури. Фізичні основи метода. Енергія оже-електронів. Фактори, що впливають на вихід оже-електронів. Перетин 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. Спеціальні методи для вивчення тонкошарових структур. Абсолютна чутливість методики оже-спектроскопії. Застосування спектрів $N(E)$ та dN/dE . Виключення фону. Завдання для самостійної роботи.	4		8

	1. Вивчення матеріалу лекції. 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.			
5	Тема 5. Аналіз рентгенівських спектрів. Аналіз рентгенівських фотоелектронних спектрів. Аналіз рентгенівських емісійних спектрів. Аналіз оже-спектрів. Завдання для самостійної роботи. 1. Вивчення матеріалу лекції. 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.	4		7
	Модульна контрольна робота			2
Розділ 2. Експериментальні методи досліджень атомної та електронної будови неупорядкованих систем .				
6	Тема 6. Атомні функції розподілу. Основні закономірності атомних функцій розподілу електронної густини. Завдання для самостійної роботи. 1. Вивчення матеріалу лекції. 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.	2		8
7	Тема 7 Рентгенівська спектроскопія поглинання. EXAFS-спектроскопія. 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 Ео. Фактор Дебая-Валлера. Фактор багатократного розсіювання. Завдання для самостійної роботи. 1. Вивчення матеріалу лекції. 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.]	4		8
8	Тема 8. XANES-спектроскопія. Прості моделі рентгенівського поглинання вільного атома. Головний край рентгенівського поглинання вільного атома. Рентгенівський К-край поглинання газоподібного аргону. Молекулярна модель поглинання. Зонне поглинання. Рентгенівський екситон. Моделі рентгенівського поглинання, що засновані на теорії розсіяння. Рентгенівські резонанси. Завдання для самостійної роботи. 1. Вивчення матеріалу лекції. 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.	4		8
9	Тема 9. Тунельна спектроскопія . 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).	4		8

	Завдання для самостійної роботи . 1. Вивчення матеріалу лекції. 2. Опрацювання проблемного матеріалу, що винесений на самостійне вивчення.			
10	Тема 10. Аналіз спектральних характеристик. 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.	4		8
11	Тема 11. Спектроскопія розсіювання фотонів та нейтронів. 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.	2		
	Підсумкова модульна контрольна робота			2
	ВСЬОГО	40		80

Загальний обсяг 120 год., 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.

9. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА:

а) основна

1. Hüfner S. Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications. – 3rd ed. – Berlin: Springer, 2003. – 662 p.
2. Briggs D., Grant J. T. (eds.). Surface Analysis by Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy. – Chichester: IM Publications and Surface Spectra Limited, 2003. – 900 p.
3. Юрченко О. М., Кормош Ж. О., Савчук Т. І., Корольчук С. І. Електронна спектроскопія: навчальний посібник. – Луцьк: Волинський національний університет імені Лесі Українки, 2021. – 100 с.
4. Шкумат А. П. Електронна спектроскопія в хімічних дослідженнях та в хімічному матеріалознавстві. Лабораторний практикум: навчальний посібник. – Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2015. – 168 с.
5. Спектроскопічні методи аналізу: навчальний посібник / за ред. О. Є. Федоренка. – Запоріжжя: Запорізький національний університет, 2014. – 320 с.
6. Якунов А.В. Техніка та методи спектральних досліджень: Методичні вказівки до лабораторних робіт для студентів фізичного факультету. – К.: ВПЦ «Київський університет», 2007. – 35 с.
7. 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. І. 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., Велешук 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. І.В. Плющай, Т.В. Горкавенко, О.І. Плющай «Abinit: практичні роботи (для студентів фізичного факультету)». – Київ: Поліграфічна дільниця ІМФ НАНУ, 2024.-110 с.
5. Kordyuk, A.A., Zabolotnyy, V.B., Evtushinsky, D.V., Kim, T.K., Büchner, B., Plyushchay, I.V., Berger, H., Borisenko, S.V. Anomalously enhanced photoemission from the Dirac point and other peculiarities in the self-energy of the surface-state quasiparticles in Bi₂Se₃ // Phys. Rev. B 85, 075414 (2012).
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
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/>