



Національна академія наук України
Інститут проблем матеріалознавства
ім. І.М. Францевича



Силабус (робоча програма) навчальної дисципліни
РЕНТГЕНІВСЬКА ФОТОЕЛЕКТРОННА І ЕМІСІЙНА СПЕКТРОСКОПІЇ
X-RAY PHOTOELECTRON AND EMISSION SPECTROSCOPIES

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>третій (освітньо-науковий)</i>
Галузь знань	<i>10 «Природничі науки»</i>
Спеціальність	<i>105 «Прикладна фізика та наноматеріали»</i>
Освітня програма	<i>105 «Прикладна фізика та наноматеріали»</i>
Статус дисципліни	<i>вибіркова</i>
Форма навчання	<i>денна (очна), он-лайн/офф-лайн</i>
Рік підготовки, семестр	<i>2 курс навчання, 3 семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>3 кредити ECTS, 90 годин</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>залік</i>
Розклад занять	<i>лекція – раз на тиждень (32 години); практика/семінар/консультації – 1 раз на два тижні (16 годин); самостійна робота 41 год., у тому числі на виконання індивідуальних/домашніх завдань 20 год, залік – 1 год</i>
Мова викладання	<i>українська</i>
Інформація про викладачів	<i>д.ф.-м.н., с. н. с., зав.від. Хижун Олег Юліанович, тел. +38 097 1713001, e-mail: khyzhun@ukr.net</i>
Розміщення курсу	<i>GoogleClassroom; доступ за запрошенням викладача</i>

Програма навчальної дисципліни

1. Опис освітньої компоненти, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Навчальна дисципліни присвячена опануванню знань про експериментальні методи дослідження електронної структури та особливостей хімічного зв'язку в твердих тілах, визначення елементного складу, загальний розподіл валентних електронних станів та парціальних станів окремих атомів у розкладі по типу їх симетрії, величини перенесення електронної густини від атомів одного сорту до атомів іншого сорту за даними досліджень рентгенівських емісійних смуг та рентгенівських фотоелектронних спектрів

внутрішніх та валентних електронів. Отримані знання допоможуть слухачам глибше розуміти властивості матеріалів виходячи з особливостей їх структури та характеру хімічного зв'язку, їх стабільності залежно від складу і температури.

Предмет освітньої компоненти- електронна структура та хімічний зв'язок у твердих тілах та вплив на ці властивості наявності певного типу вакансій, їх впорядкування, заміщення атомів одного сорту атомами іншого сорту, окиснення поверхні матеріалів у випадку її контакту з навколишнім середовищем тощо.

Метою освітньої компоненти є формування у здобувачів вищої освіти (з.в.о.) рівня PhD компетентностей:

Інтегральна компетентність:

Здатність продукувати нові ідеї, розв'язувати комплексні проблеми професійної та/або дослідницько-інноваційної діяльності у сфері прикладної фізики та наноматеріалів, застосовувати методологію наукової та педагогічної діяльності, проводити власне наукове дослідження, результати якого мають наукову новизну, теоретичне та практичне значення.

Загальні компетентності:

ЗК01. Здатність до освоєння і системного аналізу через наукове сприйняття і критичне осмислення нових знань.

ЗК02. Здатність до критичного аналізу і креативного синтезу нових ідей.

ЗК03. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК04. Здатність до оприлюднення наукових результатів перед академічною аудиторією та громадськістю як на національному, так і на міжнародному рівні.

ЗК07. Здатність дотримуватися етичних норм та авторського права при проведенні наукових досліджень, діяти на основі принципів академічної доброчесності, а також ставитися із повагою до національних та культурних традицій, способів роботи і мислення інших.

Фахові компетентності:

ФК01. Здатність самостійно здійснювати наукову діяльність у галузі прикладної фізики з використанням новітніх наукових теорій, методів та інноваційних технологій.

ФК02. Здатність розвивати теоретичні засади, створювати і застосовувати сучасні об'єкти і процеси прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК03. Здатність розв'язувати комплексні проблеми в галузі прикладної фізики та наноматеріалів з урахуванням міжгалузевих зв'язків для забезпечення потреб у високоефективних матеріалах, енерго- та ресурсозберігаючих технологіях.

ФК08. Здатність до постійного самовдосконалення у професійній сфері, відповідальність за навчання інших при проведенні науково-педагогічної діяльності та наукових досліджень в галузі прикладної фізики та наноматеріалів.

ФК09. Здатність до генерації нових ідей, самостійного планування та здійснення наукової діяльності, адаптації та впровадження інноваційних технологій з урахуванням експлуатаційних вимог.

Програмні результати навчання. Після засвоєння освітньої компоненти аспіранти мають продемонструвати такі результати навчання:

РН01. Проявляти наукові погляди та підходи при оцінюванні варіантів створення нових перспективних матеріалів з заданим рівнем властивостей.

PH02. Володіти концептуальними та методологічними знаннями в галузі прикладної фізики та наноматеріалів бути здатним застосовувати їх до професійної діяльності на межі предметних галузей.

PH03. Інтегрувати існуючі методик та методи досліджень та адаптувати їх для розв'язання наукових завдань при проведенні дисертаційних досліджень.

PH12. Демонструвати навички роботи з сучасним обладнанням при проведенні експериментальних досліджень з прикладної фізики та наноматеріалів.

PH18. Дотримуватись етичних норм, враховувати авторське право та норми академічної доброчесності при проведенні наукових досліджень, презентації їх результатів та у науково-педагогічній діяльності.

2. Місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою

Перелік освітніх компонент, знань та умінь, володіння якими необхідні аспіранту для успішного засвоєння освітньої компоненти:

Пререквізити:	
Методологія наукових досліджень	Розуміння теоретичних засад, методів та способів наукового пізнання з метою набуття відповідних компетентностей, створення необхідного підґрунтя і мотивації для самостійного проведення фахових наукових досліджень, зокрема, в області прикладної фізики та наноматеріалів.
Основи наноматеріалів та нанотехнологій	Теоретичні основи будови, властивостей і методів отримання наноструктур і наноструктурних матеріалів, достатні для самостійного подальшого проведення досліджень в цієї галузі і наступного оволодіння методами дослідження їх електронної структури та хімічного зв'язку, дослідження енергетичного розподілу електронних станів у валентній смугі, опанування експериментальними методами, котрі дають вичерпну інформацію про загальний розподіл валентних електронних станів та парціальних станів окремих атомів у розкладі по типу їх симетрії, величини перенесення електронної густини від атомів одного сорту до атомів іншого сорту, що дуже важливо у виконанні власних дисертаційних досліджень.
Науково-дослідна практика	Здобуття навичок, достатніх для проведення досліджень з відповідного напрямку.
Постреквізити:	
Наукова складова	Планування і виконання експериментальних досліджень з використанням сучасних методів та методик дослідження, критичний аналіз результатів досліджень.

3. Зміст освітньої компоненти

Тема 1. Вступ до рентгеноспектральних методів досліджень конденсованого стану речовини.

Основи рентгенівської фотоелектронної спектроскопії. Основи рентгенівської емісійної спектроскопії. Основи рентгенівської абсорбційної спектроскопії.

Тема 2. Рентгенівська фотоелектронна спектроскопія (РФС).

Фізичні основи методу, рентгенівські фотоелектронні спектри внутрішніх електронів, рентгенівські фотоелектронні спектри валентних електронів, спін-орбітальне розщеплення, джерела випромінювання для отримання РФС-спектрів, методики калібрування енергетичної шкали спектрометрів, методи врахування поверхневої зарядки досліджуваного зразка.

Тема 3. Застосування методу рентгенівської фотоелектронної спектроскопії для визначення процентного вмісту хімічних елементів у досліджуваних зразках

Фізичні основи методик визначення процентного вмісту хімічних елементів у досліджуваних зразках, методики калібрування інтенсивності РФС-спектрів та врахування фону, shake-up і shake-off ефекти.

Тема 4. Застосування методу рентгенівської фотоелектронної спектроскопії для визначення зарядового стану хімічних елементів у зразку.

Основи методик визначення зарядового стану хімічних елементів у зразку, залежність енергетичного зсуву РФС-спектрів при формуванні дкфкетів кристалічної структури, застосування РФС-методу для вивчення процесів фотокаталітичних реакцій.

Тема 5. Методики розбиття РФС-спектрів на складові компоненти та їх застосування для визначення наявності різних типів іонів (атомів з різним зарядовим станом) у досліджуваній речовині.

Програма CasaXPS та її застосування для визначення наявності різних типів іонів (атомів з різним зарядовим станом) у досліджуваній речовині (сполуці).

Тема 6. Переваги і недоліки застосування лабораторних і синхротронних методів збудження РФС-спектрів.

Застосування синхротронного випромінювання для реалізації методу рентгенівської фотоелектронної спектроскопії. Вибір ґраток та ондулятора для дослідження електронної структури певних типів сполук. Застосування методу РФС з кутовою роздільною здатністю для визначення зонної структури напівпровідникових кристалів.

Тема 7. Ультрафіолетова фотоелектронна спектроскопія (УФС).

Фізичні основи методу, УФС-спектри валентних електронів, джерела випромінювання для отримання УФС-спектрів, методики калібрування енергетичної шкали УФС-спектрометрів, порівняння переваг і недоліків РФС та УФС для дослідження електронної структури різних типів сполук.

Тема 8. Рентгенівська емісійна спектроскопія (РЕС).

Фізичні основи методу, рентгенівські діаграмні лінії та емісійні смуги, правила відбору, недіаграмні РЕС-лінії, різні методи збудження РЕС-спектрів, методи нормування спектрів та отримання інформації про величину перенесення електронного заряду.

Тема 9. Рентгенівська абсорбційна спектроскопія (РАС).

Фізичні основи методу РАС, рентгенівські краї поглинання, правила отримання інформації про величину перенесення електронного заряду за вимірюваннями енергетичних зсувів точок перегину рентгенівських країв поглинання

Тема 10. Рентгенівські спектрометри.

Типи рентгенівських спектрометрів, круг Роуланда, методи реєстрації РЕС-спектрів, первинний і вторинний методи збудження РЕС-спектрів, методи нормування

рентгенівських емісійних смуг на відповідні діаграмні лінії та отримання інформації про величину перенесення електронного заряду.

Тема 11. Суміщення РФС-, PEC- та PAC-спектрів у єдиній енергетичній шкалі.

Методика зведення РФС-, PEC- та PAC-спектрів у єдину енергетичну шкалу з метою отримання інформації про зонну структуру досліджуваних сполук. Методики суміщення у єдиній енергетичній шкалі РФС-, PEC- та PAC-спектрів та кривих повної та парціальних густин електронних станів, що отримуються теоретичними розрахунками «з перших принципів».

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці інституту, а також може бути надана в електронному вигляді. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні.

Базова література:

1. J.A. van Bokhoven, C. Lamberti. *X-Ray Absorption and X-Ray Emission Spectroscopy: Theory and Applications*. Wiley, 2016.
2. S. Hüfner, *Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications*, 3rd ed. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 2003.
3. A. Meisel, G. Leonhardt, R. Szargan, *X-Ray Spectra and Chemical Binding*, Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 1989.
4. Поплавко Ю. М. *Фізика твердого тіла. [в 2-х томах]* / Ю. М. Поплавко; КПІ ім. Ігоря Сікорського.- Київ: Політехніка, 2017. – 416 с.
5. Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. 7th ed. John Wiley & Sons, Inc. New York – London, 1996.

Додаткова література:

1. F. Wooten, *Optical Properties of Solids*, Academic Press, New York, 1972.
2. J.M. Ziman. *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge University Press, 1972.
3. J. Tauc, *Amorphous and Liquid Semiconductors*, Plenum, New York, 1974.
4. N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College, Philadelphia, 1976.
5. A. Ievtushenko, V. Karpyna, O. Khyzhun, O. Bykov, O. Olifan, P. Lytvyn, O. Yarmolenko, V. Tkach, V. Baturin, O. Karpenko. *The effect of magnetron power and oxygen pressure on the properties of NiO films deposited by magnetron sputtering in layer-by-layer growth regime* // *Vacuum*. – 2023. – 215. – P. 112375.
6. *Practical Surface Analysis (the 2nd Edition): Vol. 1: Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy* (Edited by D. Briggs and P.M. Seach), John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 1990.
7. M.Ya. Rudysh, A.O. Fedorchuk, V.Yo. Stadnyk, P.A. Shchepanskyi, R.S. Brezvin, B.I. Horon, O.Yu. Khyzhun, O.M. Gorina. *Structure, electronic, optical and elastic properties of (NH₄)₂BeF₄ crystal in paraelectric phase*. *Current Applied Physics* 45 (2023) 76-85. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2022.11.005>
8. Tuan V. Vu, O. Khyzhun, G.L. Myronchuk, M. Denysyuk, L. Piskach, A.O. Selezhen, I. Radkowska, A.O. Fedorchuk, S.S. Petrovska, V.A. Tkach, M. Piasecki. *Insights from Experiment and Theory on Peculiarities of the Electronic Structure and Optical Properties of the Tl₂HgGeSe₄ Crystal*. *Inorg. Chem* 62, 41 (2023) 16691–16709. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.3c01756>
9. M. Batouche, T. Seddik, Tuan V. Vu, W. Ouerghui, Dj Hemidi, Dat D. Vo, O.Y. Khyzhun, Nguyen N. Hieu. *First-principles calculation of the electronic, optical, and photo-*

electrochemical properties of CaM_2S_4 ($M = \text{Sc}, \text{Y}$) compounds. Materials Science in Semiconductor Processing 164 (2023) 107600.
<https://doi.org/10.1016/j.mssp.2023.107600>.

10. Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. 7th ed. John Wiley & Sons, Inc. New York – London, 1996.
11. J. Kohanoff, N.I. Gidopoulos, *Density Functional Theory: Basics, New Trends and Applications*, In: *Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry* (Ed. by S. Wilson) (Volume 2, Part 5, Chapter 26), John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2003, pp. 532-568ю

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Передбачено комплексний підхід, що поєднує лекції та семінари, а також розгляд питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій застосовується ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені в GoogleClassroom. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої. Метою практичних занять є закріплення теоретичних знань, отриманих на лекціях та в процесі самостійної роботи з літературними джерелами в ході вивчення освітнього компонента.

6. Самостійна робота

Самостійна робота включає повторення лекційного матеріалу, опрацювання рекомендованої літератури, що дозволяє розширити та поглибити знання з дисципліни, підготовку до практичних завдань та заліку.

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Відвідування лекційних та семінарських занять, які можуть проводитись як он-лайн, так і офф-лайн, є обов'язковим. У випадку відсутності на занятті аспіранти зобов'язані повідомити викладача заздалегідь і надати документальне підтвердження причини відсутності, якщо це можливо. На початку кожної лекції проводиться опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня обізнаності здобувачів за даною темою та підвищення зацікавленості. Під час сигналу повітряної тривоги заняття негайно припиняється, а всі учасники навчального процесу повинні пройти в найближче укриття. Для завершення заняття організується додатковий час.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів. Заохочувальні бали можуть нараховуватись викладачем за активну участь у заняттях, виконання творчих робіт з освітнього компонента або додаткового проходження он-лайн профільних курсів з отриманням відповідного сертифікату. Але їх сума не може перевищувати 25% від рейтингової шкали. Штрафні бали в рамках освітньої програми не передбачені.

Політика дедлайнів та перескладань. Дедлайни здачі завдань та контрольних робіт є обов'язковими. У разі поважних причин, аспіранти можуть звернутись до викладача для можливої зміни продовження термінів. Запити на продовження дедлайну повинні бути подані заздалегідь.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

В рамках навчальної дисципліни передбачено кілька видів контролю та систему рейтингування результатів навчання, а саме:

Поточний контроль: опитування під час лекцій та на семінарських заняттях.

Семестровий контроль: залік.

Рейтингова система оцінювання формується з суми балів, набраних під час поточного та семестрового контролю. Рейтинг аспіранта R розраховується за 100 бальною шкалою та складається з балів, що він отримує протягом семестру (стартовий рейтинг) S та диференційованого заліку C . Додаткові бали D можна отримати за активну участь у заняттях, виконання творчих робіт з освітньої компоненти або додаткового проходження он-лайн профільних курсів з отриманням відповідного сертифікату. Таким чином, сумарний рейтинговий бал розраховується як

$$R=S + C + D$$

Стартовий рейтинг S складається з балів, що аспірант отримує за відвідування занять (1 бал), правильну відповідь при поточному опитуванні (2 бали), виконання творчого завдання (5 балів). Максимальна сума балів, яку аспірант може набрати протягом семестру (стартовий рейтинг), складає 50 балів. Умовою допуску до екзамену є кількість рейтингових балів не менше 30.

На екзамені аспіранти виконують письмову тестову роботу, що складається з 5 питань. Кожне запитання (завдання) оцінюється в 10 балів. Умовою успішної здачі заліку є кількість отриманих за залікову роботу балів не менше 30.

Сумарний рейтинговий бал розраховується за формулою:

$$R=S + C + D,$$

де S – стартовий рейтинг;

C – залік;

D – додаткові бали.

Відповідність між кількістю балів, оцінкою за національною шкалою та шкалою ECTS наведена в таблиці.

Кількість балів	Шкала ECTS	Оцінка за національною шкалою
90-100	A	Відмінно
85-89	B	Добре
75-84	C	
65-74	D	Задовільно
60-64	E	
Менше 60	FX	Незадовільно
Не виконані умови допуску		Не допущено

9. Додаткова інформація з освітньої компоненти

Робочу програму освітньої компоненти (силабус):

Складено зав. від., д ф.-м. н., с. н. с. Хижун О.Ю.

Ухвалено Вченою радою Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича Національної академії наук України (протокол №10 від «06» серпня 2024 р.).