

Программа
краткосрочного повышения квалификации преподавателей и научных работников высшей школы
по направлению
«Методы диагностики и исследования наноструктур»
на базе учебного курса

«Спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии»

Цель: изучение физических принципов и спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

Категория слушателей: преподаватели и научные работники высшей школы

Срок обучения: 36 часов

Форма обучения: с частичным отрывом от работы

Режим занятий: 8 часов в день

Целью изучения курса является получение фундаментальных знаний в области электронно-спектроскопических исследований свойств наноматериалов – области знаний, имеющей большое значение для современного материаловедения, физики наноразмерных и молекулярных структур, физики и химии конденсированного состояния и тонких пленок. Задачи курса состоят в изучении первичной и вторичной структуры спектров.

Требования к уровню освоения учебного курса

Преподаватели должны:

- Знать:
 - область применения рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС);
 - физические принципы РФЭС и рентгеновского микроанализа;
 - устройство оборудования для проведения исследований методом РФЭС;
 - структуру спектров РФЭС.
- Иметь навыки:
 - сбора, систематизации и анализа научно-технической и другой профессиональной информации в области применения РФЭС;
 - включать приобретенные знания о РФЭС в уже имеющуюся систему знаний и применять эти знания в самостоятельных методических разработках;
 - переносить полученные знания о РФЭС на смежные предметные области и к использованию этих знаний для построения междисциплинарных методических разработок.
- Иметь представление:
 - о методе РФЭС;
 - о процедуре получения спектров с помощью РФЭС;
 - о причинах возникновения ложных пиков в РФЭС;

Научные работники должны:

- 1. Знать:
 - область применения рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС);
 - физические принципы РФЭС и рентгеновского микроанализа;
 - устройство оборудования для проведения исследований методом РФЭС;
 - структуру спектров РФЭС.
- Иметь навыки:
 - сбора, систематизации и анализа научно-технической и другой профессиональной информации в области применения РФЭС;
 - включать приобретенные знания о РФЭС в уже имеющуюся систему знаний и применять эти знания в самостоятельных методических разработках;

- переносить полученные знания о РФЭС на смежные предметные области и к использованию этих знаний для построения междисциплинарных методических разработок.
- Иметь представление:
 - о методе РФЭС;
 - о процедуре получения спектров с помощью РФЭС;
 - о причинах возникновения ложных пиков в РФЭС;

Учебный курс «Спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии» состоит из дистанционной и очной частей.

Дистанционная часть учебного образовательного курса обеспечивает слушателя необходимым объемом знаний по выбранной тематике. Задача дистанционной составляющей учебного курса – подготовить слушателя к очному посещению лаборатории в Московском инженерно-физическом институте.

В дистанционной (теоретической) части учебного курса изложен материал для изучения первичной и вторичной структуры спектров РФЭС. Теоретическая часть учебного курса состоит из двенадцати лекций:

Лекция 1: Обзорный спектр РФЭС

Обзорный спектр. Характерные особенности обзорного спектра. Первичная структура РФЭ спектров. Основные уровни. Спектральный фон. Спектральные линии. Интенсивность спектральной линии. Ширина спектральной линии.

Лекция 2: Форма спектральной линии

Первичная структура. Форма спектральной линии. Выражение Дониаха-Шуньича. Явление "инфракрасной катастрофы". Отклик электронной системы на внезапное появление возбуждающего потенциала. Свертка функции Лоренца. Приборное уширение.

Лекция 3: Спин-орбитальное расщепление уровней

Первичная структура, спин-орбитальное расщепление уровней. РФЭ спектры спин-орбитальных дублетов основных уровней. Значения энергии спин-орбитального расщепления.

Лекция 4: Валентные уровни

Первичная структура, валентные уровни. РФЭ спектр валентных уровней. Экспериментальный спектр валентной зоны. Ультрафиолетовое излучение.

Лекция 5: Оже-переходы

Первичная структура, серии оже-переходов, возбуждаемых рентгеновским излучением. Используемые источники рентгеновского излучения. Метод определения оже-линий. Независимость ширины оже-электронных линий в РФЭ спектрах от ширины линии рентгеновского излучения.

Лекция 6: Химический сдвиг энергии связи

Первичная структура, сдвиг фотоэлектронных и оже-электронных линий. Химический сдвиг энергии связи. Модель зарядового потенциала. Увеличение радиуса валентной орбитали. Уменьшение плотности валентных электронов.

Лекция 7: Поверхностный сдвиг энергии связи

Первичная структура, поверхностный сдвиг энергии связи. Изменение энергии релаксации. Методы расчета поверхностных сдвигов энергии связи основных электронных уровней в металлах.

Лекция 8: Размерный сдвиг энергии связи

Первичная структура, размерный сдвиг энергии связи. Метод оже-параметра. Идентификации элементов и химических соединений в методе РФЭС. Размерный сдвиг оже-параметра.

Лекция 9: Ложные и истинные пики

Вторичная структура. Ложные пики низкой активности. Рентгеновские сателлиты и рентгеновские духи. Истинные пики вторичной структуры РФЭ спектров. Мультиплетное расщепление.

Лекция 10: Сателлиты

Вторичная структура. Сателлиты встряски, стряхивания и асимметрия спектров. Индекс сингулярности. Эффект экранировки остовной дырки. Правило сумм Фриделя.

Лекция 11: Плазмонные колебания

Вторичная структура, сателлиты плазмонных возбуждений. Вывод выражения для частоты плазмонных колебаний. Задача о колебании электронной плотности в двумерном слое. Возбуждение плазмонных колебаний. Энергия плазмонных колебаний. Плазмонные сателлиты в РФЭ спектрах.

Лекция 12: Формирования заряда в образце

Эффект статической зарядки непроводящих образцов. Характерные области формирования заряда в образце. Объемный заряд образуется в приповерхностном слое. Поверхностный потенциал образца.

Очная (экспериментальная) часть учебного курса заключается в ознакомлении со спектрометром XSAM-800 и программой обработки РФЭ спектров. Обзорные спектры. Идентификация элементов. Фитирование спектров остовных уровней. Основные задания на лабораторный практикум:

1. Установить и научиться работать с программой просмотра и обработки спектров Viewer на примере выданного файла обзорного и частичного спектров пленки молибдена, осажденной на поверхность высокоориентированного пиролизованного графита (Mo/ВОПГ). Научиться определять положение спектральных линий, фиттировать спектральные линии функцией Гаусса, определять их основные характеристики (интенсивность и ширину на полувысоте).
2. Для выданного обзорного спектра неизвестного элемента/соединения определить найти наиболее интенсивные спектральные линии, определить их положения (BE или KE), с помощью прилагаемых таблиц или баз данных в интернете идентифицировать данные пики. По совокупности данных определить, из каких элементов состоит неизвестный образец и предложить его состав (например, металлическая медь со адсорбированным на ее поверхности слоем углерода и кислорода, оксид кремния, и т.д.)

Методические рекомендации по реализации учебной программы

На дистанционную и очную части учебного курса отводится по 18 часов соответственно. Полное содержание лекций в электронной дистанционной части учебного курса находится на сайте www.nanoobr.ru. Для контроля степени освоения теоретической части учебного курса (лекций) используются **тестовые вопросы** для самопроверки и **контрольные вопросы**.

Тестовые вопросы к курсу

«Спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии»

Лекции 1-8

1. Что не входит в первичную структуру РФЭ спектра?

- | | |
|---|--|
| А) Линии остовных уровней | Б) Линии оже-электронов, возбуждаемых рентгеновским излучением |
| В) Спин-орбитальное расщепление уровней | Г) Линии валентных уровней |
| Д) Мультиплетное расщепление уровней | |

2. Чем определяется ширина спектральной линии?

- | | |
|------------------------|--------------------------------------|
| А) Приборным уширением | Б) Естественной шириной электронного |
|------------------------|--------------------------------------|

В) Шириной линии рентгеновского излучения

уровня
Г) Давлением в камере

3. От каких факторов зависит поверхностный сдвиг?

А) От числа ближайших соседей

Б) От давления в камере

В) Ни от чего не зависит

Лекции 9-12

1. Чему равны характерные потери энергии за счет плазмонов? (в ЭВ)

А) 5-15

Б) 50-100

В) 0.1-1

2. Если при возбуждении электрон переводится из свободного состояния непрерывного спектра в связанное состояние в атоме, и конечным состоянием является состояние иона с вакансиями на валентном и основном уровне, то процесс электронного возбуждения называют стряхиванием электрона (shake-off)?

А) Верно

Б) Неверно

Контрольные вопросы для проверки материала в количестве 10 вопросов

- 1) Можно ли получить I_s спектр атомов H, адсорбированных на поверхности Pd с помощью РФЭС ($h\nu=1253,6$ эВ);
- 2) Чем определяется уширения РФЭ линии;
- 3) Многочастичные явления в РФЭ спектроскопии;
- 4) При каком режиме возбуждения основных электронов (адиабатическом или внезапном) будет наблюдаться рождение электрон-дырочных пар;
- 5) Возможно ли возбуждение e-h пар в Si. Оценить время заполнения поверхности при нормальных условиях до 1 mL
- 6) Чем различается спин-орбитальное и мультиплетное расщепление;
- 7) Мультиплетная структура РФЭ спектров ($Mn3s$ в MnF_2)
- 8) Сателлиты: shake of и shake up;
- 9) Объясните причину ассиметричной формы РФЭ спектров. В чем заключается явление ортогональной катастрофы Андерсона;
- 10) Коллективные и одноэлектронные переходы, как причина сателлитной структуры РФЭ спектров.

В конце очной части учебного курса слушатели готовят отчеты по **темам контрольных рефератов**, которые используются для контроля степени усвоения всего учебного курса на базе экспериментальных результатов и их обработки с применением знаний из дистанционной части курса.

Темы контрольных рефератов по курсу
«Спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии»

1. Методы исследования наноструктур и поверхностей твердых тел.
2. История развития метода РФЭС и его физические принципы.
3. Методика и последовательность проведения экспериментов по РФЭС.
4. Качественный анализ спектров
5. Количественный анализ спектров
6. Первичная структура спектров РФЭС
7. Вторичная структура спектров РФЭС

Учебно-тематический план

| № | Название учебного курса и лекций | Всего, час. | в том числе (указать часы) | | | Форма контроля |
|----|---|-------------|---|---|---|--|
| | | | Дистанционные лекции (самостоятельное изучение, дистанционное общение с преподавателем, вопросы-ответы через email, форум, чат и др.) | Самостоятельная работа. Подготовка ответов на контрольные вопросы | Очный практикум или другое практическое задание | |
| | <u>«Спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии»</u> | 36 ч. | 12 ч. | 6 ч. | 18 ч. | Контрольные вопросы (электронная зачётка) Реферат |
| 1. | Лекция 1: Структура РФЭ спектров | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 2. | Лекция 2: Спектры РФЭС: первичная структура, форма спектральной линии | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 3. | Лекция 3: Спектры РФЭС: первичная структура, спин-орбитальное расщепление уровней | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 4. | Лекция 4: Спектры РФЭС: первичная структура, валентные уровни | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 5. | Лекция 5: Спектры РФЭС: первичная структура, серии оже-переходов, возбуждаемых рентгеновским излучением | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 6. | Лекция 6: Спектры РФЭС: первичная структура, сдвиг фотоэлектронных и оже-электронных линий | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 7. | Лекция 7: Спектры РФЭС: первичная структура, поверхностный сдвиг энергии связи | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 8. | Лекция 8: Спектры РФЭС: первичная структура, размерный сдвиг энергии связи | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 9. | Лекция 9: Спектры РФЭС: вторичная структура, ложные и истинные пики интенсивности | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |

| | | | | | | |
|-------------------|---|--|------|---|---------|--|
| 10. | Лекция 10: Спектры РФЭС: вторичная структура, сателлиты встряски, стряхивания и асимметрия спектров | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 11. | Лекция 11: Спектры РФЭС: вторичная структура, сателлиты плазмонных возбуждений | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| 12. | Лекция 12: Спектры РФЭС: эффект статической зарядки непроводящих образцов | | 1 ч. | 0,5 ч. | | |
| Итоговый контроль | | | | Контрольные вопросы (электронная зачётка) | Реферат | |

Список литературы (основной и дополнительной), а также других видов учебно-методологических материалов и пособий, необходимых для изучения (конспектов лекций, видеолекций, лазерных дисков и др.).

Список литературы и др. дополнительных источников информации в кол-ве – 6.

1. *Методы анализа поверхности*, под ред. А. Зандерны, - М.: Мир, 1979.
2. Д. Бриггс, М.П. Сих, *Анализ поверхности методами оже-электронной и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии*, - М.: Мир, 1987.
3. Д. Вудраф, Т. Делчар, *Современные методы исследования поверхности*, - М.: Мир, 1989.
4. В.А. Трапезников, И.Н. Шабанова, *Рентгеноэлектронная спектроскопия сверхтонких поверхностных слоев конденсированных систем*. - М.: Наука, 1988.
5. В.И. Нефедов, *Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия химических соединений*, - М.: Химия, 1984.
6. В.Д. Борман, А.П. Менушенков, М.А. Пушкин, В.И. Троян В.Н. Тронин, *Физические основы методов исследования электронных свойств и локальной структуры функциональных наноматериалов для энергетики*, - Москва, 2009.

Полное содержание лекций в электронной дистанционной части учебного курса на сайте www.nanoobr.ru