

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

«Введение в рентгеновскую фотоэлектронную спектроскопию»

Цель: изучение физических принципов рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

Категория слушателей: преподаватели и научные работники высшей школы

Срок обучения: 36 часов

Форма обучения: с частичным отрывом от работы

Режим занятий: 6 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 методики проведения экспериментов при помощи РФЭС, отличительных особенностей и физических принципов РФЭС, изучении качественного и количественного анализа РФЭ 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 полученных 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 «Введение в рентгеновскую фотоэлектронную спектроскопию» 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 изложены физические основы метода рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Теоретическая часть учебного курса состоит из девяти лекций:

Лекция 1: Введение в методы исследования наноструктур и поверхностей твердых тел

Классификация методов исследования наноструктур и поверхности твердого тела. Сверхвысокий вакуум. Основные способы получения атомарно-чистой поверхности. Основные характеристики СВВ систем для анализа поверхности. Последовательность проведения эксперимента.

Лекция 2: Введение в РФЭС

Историческая справка. Отличительные особенности РФЭС. Физические принципы РФЭС. Уравнение фотоэффекта. Схема измерения энергии связи в РФЭС. Кинетическая энергия покидающего образец фотоэлектрона. Непроводящий и изолированный от контакта со спектрометром образец.

Лекция 3: Введение в спектры РФЭС

Качественный анализ спектров. Слабая связь, сильная связь. Обзорный спектр образца. Рентгеновские и спектроскопические обозначения электронных уровней.

Лекция 4: Количественный анализ спектров РФЭС

Количественный анализ спектров. Расчет интенсивности. Характеристика процесса фотоионизации. Сечение фотоионизации. Суперпозиция одноэлектронных волновых функций. Дифференциальное сечение фотоионизации. Параметр асимметрии.

Лекция 5: Характеристика образца

Характеристика образца. Неупругие потери. Средняя длина свободного пробега. Экспериментальное определение СДСП. Измерение угловой зависимости интенсивности фотоэлектронного пика.

Лекция 6: Влияние аппаратуры на спектры РФЭС

Аппаратный фактор. Режим работы энергоанализатора с постоянным коэффициентом замедления. Режим работы энергоанализатора с постоянной энергией пропускания. Влияние геометрии эксперимента.

Лекция 7: Фотоэлектронные линии

Расчет интенсивности фотоэлектронной линии. Фактор чувствительности. Количественный анализ образца методом РФЭС. Определение относительных сечений фотоионизации.

Лекция 8: Расчет энергии связи

Количественный анализ спектров. Расчет энергии связи. Характерные времена процессов. Метод Хартри-Фока. Детерминант Слэтера. Запрет Паули. Кулоновские и обменные интегралы. Теорема Купманса.

Лекция 9: Процесс релаксации

Количественный анализ спектров. Расчет энергии связи. Процесс релаксации. Энергия релаксации. Вклад энергии релаксации в измеряемую РФЭС энергию связи электрона. Корреляционные и релятивистские эффекты.

Очная (экспериментальная) часть учебного курса заключается в ознакомлении со спектрометром XSAM-800 и программой обработки РФЭС 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

«Введение в рентгеновскую фотоэлектронную спектроскопию»

Лекция 1: Введение: методы исследования наноструктур и поверхностей твердых тел

1. С помощью каких методов можно исследовать электронные свойства наноструктур?
А) ПЭМ, АСМ
Б) РФЭС, УФЭС
В) ОЭС, СРБИ
Г) ПЭМ, УФЭС
2. За какое время происходит осаждение одного монослоя кислорода при атмосферном давлении на чистую поверхность?
А) Времена порядка наносекунд
Б) Осаждения не происходит
В) За времена порядка часа
3. Выберите правильную последовательность проведения эксперимента.
А) Достижение СВВ в основных камерах установки для исследования поверхности
Б) Подготовка поверхности образца на атмосфере
В) Загрузка образца в камеру препарирования через шлюзовую камеру с последующей откачкой камер до первоначального уровня вакуума
Г) Подготовка поверхности образца в условиях СВВ
Д) Перемещение образца на штоке в камеру анализатора в условиях СВВ
Е) Анализ образца различными методами исследования

Лекция 2: Введение в РФЭС: историческая справка, особенности и физические принципы

1. На чём основан метод РФЭС?

- А) На дифракции электронов
Б) На неупругом рассеянии быстрых электронов
В) На явлении фотоэффекта

2. Какова средняя длина свободного пробега для фотоэлектрона в металле? (в ангстремах)

- А) ~10
Б) ~200
В) ~0.1
Г) ~1000

3. Какое из этих двух утверждений верно:

- 1) При помощи РФЭС можно исследовать химические сдвиги.
2) При исследовании, рентгеновское излучение ощутимо повреждает исследуемую поверхность.

- А) Только второе
Б) Только первое
В) Оба неверны
Г) Оба верные

Лекции 3 - 9

1. Что определяют соответствующие квантовые числа?

- А) Азимутальное распределение плотности вероятности локализации электрона в атоме
Б) Величину собственного момента импульса
В) Номер энергетического уровня
Г) Пространственное расположение атомной орбитали

2. Слабый тип связи наиболее адекватно описывает атомы для которых:

- А) взаимодействие моментов для каждого из электронов сильнее, чем взаимодействие порознь орбитальных и спиновых моментов различных электронов между собой
Б) взаимодействие орбитальных и собственных моментов количества движения электронов друг с другом сильнее, чем взаимодействие моментов для каждого электрона в отдельности
В) взаимодействие орбитальных и собственных моментов количества движения электронов друг с другом слабее, чем взаимодействие моментов для каждого электрона в отдельности

3. К чему приводит экранировка дырки электронами?

- А) Энергия системы не изменяется
Б) К понижению общей энергии системы
В) К повышению общей энергии системы

Контрольные вопросы для проверки материала в количестве 17 вопросов

- 1) Оценить время заполнения поверхности при нормальных условиях до 1 mL
- 2) Физический смысл соотношения $n_{\text{алс}} \sqrt{m} \approx \varepsilon$ (экспозиция)
- 3) Показать необходимость использования сверхвысокого вакуума (СВВ)
- 4) Требования к средствам получения СВВ
- 5) Методики исследования электронных свойств поверхности наноструктур
- 6) Объясните различие измерения энергии связи в металлах и полупроводниках в РФЭС
- 7) Каков принцип работы полусферического анализатора
- 8) Прокомментируйте процессы излучательных и безизлучательных переходов при возбуждении основной дырки
- 9) Дайте физическую интерпретацию химического сдвига в РФЭС
- 10) Слабая ($L-S$) и сильная ($j-j$) связи в атоме;
- 11) Соответствие рентгеновских и спектроскопических обозначений в спектроскопии;
- 12) Сечение фотоионизации;
- 13) Физические процессы, определяющие длину свободного пробега фотоэлектронов. роль потерь энергии электронов на возбуждение плазмонов;
- 14) Интерпретация зависимости длины свободного пробега электрона в твердом теле от его кинетической энергии;
- 15) Режимы работы анализатора электронов (FRR и FAR);
- 16) Энергия системы: теорема Купманса;
- 17) Объясните эффекты начального и конечного состояния в РФЭС.

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

Темы контрольных рефератов по курсу «Введение в рентгеновскую фотоэлектронную спектроскопию»

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

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	
	«Введение в рентгеновскую фотоэлектронную	36 ч.	13,5 ч.	4,5 ч.	18 ч.	Контрольные вопросы (электронная

	<u>спектроскопию»</u>					зачётка)
1.	Лекция 1: Введение: методы исследования наноструктур и поверхностей твердых тел		1,5 ч.	0,5 ч.		Реферат
2.	Лекция 2: Введение в РФЭС: историческая справка, особенности и физические принципы		1,5 ч.	0,5 ч.		
3.	Лекция 3: Спектры РФЭС: качественный анализ спектров		1,5 ч.	0,5 ч.		
4.	Лекция 4: Спектры РФЭС: количественный анализ спектров, расчет интенсивности		1,5 ч.	0,5 ч.		
5.	Лекция 5: Спектры РФЭС: характеристика образца		1,5 ч.	0,5 ч.		
6.	Лекция 6: Спектры РФЭС: аппаратный фактор		1,5 ч.	0,5 ч.		
7.	Лекция 7: Спектры РФЭС: интенсивность фотоэлектронной линии		1,5 ч.	0,5 ч.		
8.	Лекция 8: Спектры РФЭС: количественный анализ спектров, расчет энергии связи. Часть 1		1,5 ч.	0,5 ч.		
9.	Лекция 9: Спектры РФЭС: количественный анализ спектров, расчет энергии связи. Часть 2		1,5 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**