


**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**Львівський національний університет імені Івана Франка**  
**Хімічний факультет**  
**Кафедра неорганічної хімії**

**Затверджено**

На засіданні кафедри неорганічної хімії  
хімічного факультету  
Львівського національного університету імені  
Івана Франка  
(протокол № 12/2 від 07.02.2020 р.)

Завідувач кафедри   
член-кореспондент НАН України,  
доктор хімічних наук, професор  
Гладишевський Р.Є.

**Силабус з навчальної дисципліни**  
**«Методи визначення електронної структури»,**  
**що викладається в межах ОПН підготовки доктора філософії**  
**(третього (освітньо-наукового) рівня вищої освіти)**  
**для здобувачів за спеціальністю 102 Хімія**

Львів 2020 р.

<b>Назва курсу</b>	Методи визначення електронної структури
<b>Адреса викладання курсу</b>	Хімічний факультет ЛНУ імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 6
<b>Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна</b>	Хімічний факультет Кафедра неорганічної хімії
<b>Галузь знань, шифр та назва спеціальності</b>	10 Природничі науки 102 Хімія
<b>Викладач курсу</b>	Котур Богдан Ярославович, д.х.н., професор
<b>Контактна інформація викладача</b>	bohdan.kotur@lnu.edu.ua
<b>Консультації по курсу відбуваються</b>	За домовленістю з аспірантами за їхньої потреби
<b>Сторінка курсу</b>	<a href="https://chem.lnu.edu.ua/academics/postgraduates">https://chem.lnu.edu.ua/academics/postgraduates</a>
<b>Інформація про курс</b>	Навчальна дисципліна є складовою частиною теоретичної підготовки аспірантів спеціалізації “неорганічна хімія”. Курс розроблено таким чином, щоб надати аспірантам необхідні знання, обов’язкові для того, щоб сформувані у них систематичні уявлення і знання про можливості електронної спектроскопії в аналізі хімічного складу, електронної структури поверхні та об’єму твердих тіл, розподілу заповнених і незаповнених енергетичних поверхневих рівнів, засвоїти теоретичні засади сучасних експериментальних методів вивчення електронної структури неорганічних речовин. Тому у курсі представлено як огляд концепцій визначення електронної структури речовин, так і процесів та інструментів, які потрібні для експериментальних досліджень у даній галузі знань
<b>Коротка анотація курсу</b>	Дисципліна «Методи визначення електронної структури» є дисципліною зі спеціальності 102 Хімія для освітньої програми підготовки аспірантів, яка викладається у 3-му семестрі в обсязі 3 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS). Вона покликана сформувані науковця, який не тільки володіє певною системою знань, умінь та навичок, а й може самостійно мислити, аналізувати, планувати і проводити наукові дослідження та одержувати нові наукові результати
<b>Мета та цілі курсу</b>	Метою вивчення курсу “Методи визначення електронної структури” є формування в аспірантів систематичних уявлень і знань про можливості електронної спектроскопії в аналізі хімічного складу, електронної структури поверхні та об’єму твердих тіл, розподілу заповнених і незаповнених енергетичних поверхневих рівнів, засвоєння теоретичних засад сучасних експериментальних методів вивчення електронної структури неорганічних речовин, що стане цінним інструментом під час виконання аспірантами дисертаційних робіт.
<b>Література для вивчення дисципліни</b>	<b>Базова:</b> 1. Немошкаленко В. В., Алешин В. Г. Электронная спектроскопия кристаллов. Киев: Наукова думка, 1983. – 283 с. 2. Немошкаленко В. В. Рентгеновская эмиссионная спектроскопия металлов и сплавов. Киев: Наукова думка, 1972. – 318 с. 3. Каробовский В.Л., Шпак А. П. Рентгеновская и электронная спектроскопия. Киев: Наукова думка, 2010. – 214 с. 4. Калмыков Б., Дмитриева Н. Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный анализ неорганических материалов: методическое пособие для студентов хим. Фак-та МГУ им. М. В. Ломоносова. Москва: изд-

	<p>во МГУ им. М.В. Ломоносова, 2017.</p> <p>5. Пентин Ю. А., Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии. Москва: Мир, 2006. – 683 с.</p> <p>6. Шишкин А. М. Взаимодействие фотонов и электронов с твердым телом. Санкт-Петербург: ВВМ, 2008.</p> <p>7. Карлсон Т. А. Фотоэлектронная и Оже-спектроскопия. Ленинград: Машиностроение, 1981. – 431 с.</p> <p>8. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ. Москва: Мир, 1984.</p> <p><b>Допоміжна:</b></p> <p>1. Біленко І. І. Фізичний словник. Київ: Вища школа, 1979. – 336 с.</p> <p>2. Зигбан К., Нордлинг К., Фальман А. и др. Электронная микроскопия. Москва: Мир, 1971. – 493 с.</p> <p>3. Количественный электронно-зондовый микроанализ. Москва: Мир, 1986.</p> <p>4. Hüfner S. Photoelectron Spectroscopy. Principles and applications. 3<sup>rd</sup> edn. Berlin: Springer, 2003.</p> <p><b>Інформаційні ресурси:</b></p> <p>1. [Електронний ресурс] <a href="http://chem.libretexts.org">http://chem.libretexts.org</a></p> <p>2. [Електронний ресурс] <a href="http://centres.lnu.edu.ua/low-temperature-studies">http://centres.lnu.edu.ua/low-temperature-studies</a></p>
<b>Тривалість курсу</b>	90 год
<b>Обсяг курсу</b>	48 год аудиторних занять, з них 32 год лекційних занять, 16 год практичних занять, та 42 год самостійної роботи (очна форма навчання) 18 год аудиторних занять, з них 12 год лекційних занять, 6 год практичних занять, та 72 год самостійної роботи (заочна форма навчання)
<b>Очікувані результати навчання</b>	<p>У результаті вивчення курсу аспірант буде</p> <p><b>знати:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- фізичні принципи процесів, що відбуваються у твердому тілі при взаємодії з рентгенівським випромінюванням;</li> <li>- класифікацію електронних та рентгенівських спектрів твердих тіл;</li> <li>- основи зонної теорії твердих тіл;</li> <li>- основні методи досліджень, що використовуються в електронній спектроскопії;</li> <li>-</li> </ul> <p><b>вміти:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- володіти стандартною термінологією, що використовується для визначення ключових понять дисципліни;</li> <li>- орієнтуватися у доборі сучасної наукової літератури з електронної та рентгенівської спектроскопії та самостійно працювати з нею;</li> <li>- добирати необхідний комплекс методик електронної та рентгенівської спектроскопії для вирішення конкретних дослідницьких завдань;</li> <li>- якісно і кількісно інтерпретувати результати вивчення електронної структури неорганічних речовин і матеріалів.</li> </ul>
<b>Ключові слова</b>	Тверде тіло, електронна структура, методи визначення
<b>Формат курсу</b>	Очний, заочний аудиторні заняття та самостійна робота
<b>Теми</b>	<b>Тема 1.</b> Проблема дослідження структури та складу матеріалів. Електронна теорія твердого тіла. Електронна спектроскопія, її значення у дослідженні твердих тіл. Види електронної спектроскопії, їх класифікація та основні характеристики.

	<p><b>Тема 2.</b> Молекулярна електронна мікроскопія. Зворотна емісійна спектроскопія. Ізохромна спектроскопія. Спектроскопія гальмівного випромінювання.</p> <p><b>Тема 3.</b> Оже-електронна спектроскопія – метод дослідження електронної структури.</p> <p><b>Тема 4.</b> Вивчення зовнішніх та внутрішніх електронних оболонок атомів і молекул та розподілу електронів у зоні провідності твердого тіла.</p> <p><b>Тема 5.</b> Рентгенівська фотоелектронна спектроскопія та її застосування для дослідження твердих тіл. Рентгеноспектральний мікроаналіз. Енергодисперсійна рентгенівська спектроскопія.</p> <p><b>Тема 6.</b> Використання електронної мікроскопії для вивчення твердого тіла у Львівському національному університеті імені Івана Франка.</p>
<b>Підсумковий контроль, форма</b>	іспит у кінці семестру письмовий
<b>Пререквізити</b>	для вивчення курсу аспіранти повинні мати базові знання з фізики та хімії твердого тіла
<b>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу</b>	лекції, колаборативне навчання (форма – тьюторство) науково-орієнтоване навчання, дискусія, підготовка рефератів за заданими темами, підготовка аспірантами синтезованих ними зразків та проведення їхніх досліджень за допомогою електронних мікроскопів, обробка та аналіз результатів
<b>Необхідне обладнання</b>	ПЕОМ, комп'ютерний проектор, електронні мікроскопи
<b>Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)</b>	Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою (ECTS). Підсумкова оцінка: відмінно (100-90 балів), добре (89-71 бал), Задовільно (51-70 балів). Жодні форми порушення <b>академічної доброчесності</b> не толеруються: списування та плагіат; несвоєчасне виконання поставленого завдання і т. ін. <b>Аспіранти заохочуються</b> до використання також й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.
<b>Питання до екзамену.</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Проблема дослідження структури та складу матеріалів. Електронна теорія твердого тіла.</li> <li>2. Енергетичні стани електрона в атомі. Електронні переходи. Основний і збуджений стани електрона.</li> <li>3. Енергетичні спектри атомів та їх детектування. Класифікація спектрів за типом збуджуваних мікросистем, за довжиною хвиль досліджуваного діапазону, за способом збудження, за фізичною основою розкладу випромінювання у спектр, за технічним одержанням, за цільовим призначенням.</li> <li>4. Спектри поглинання та емісійні спектри атомів, молекул, сполук, матеріалів. Електронна мікроскопія, її значення у дослідженні твердих тіл. Електронний мікроскоп.</li> <li>5. Види електронної спектроскопії, їх класифікація та основні характеристики.</li> <li>6. Молекулярна електронна мікроскопія. Можливості методу та області його використання.</li> <li>7. Зворотна емісійна спектроскопія. Можливості методу та області його використання.</li> <li>8. Аналіз структури електронних станів поверхні твердого тіла. Ізохромна спектроскопія. Спектроскопія гальмівного випромінювання.</li> <li>9. Фізичні основи Оже-спектроскопії. Механізм Оже-ефекту. Енергія оже-електронів. Емісійні і зондуючі методи аналізу поверхні твердого тіла.</li> </ol>

	<p>10. Метод електронної Оже-спектроскопії. Основні характеристики методу та області його використання.</p> <p>11. Рентгеноспектральний мікроаналіз. Суть методики. Електронно-зондові мікроаналізатори. Їхня будова, основні характеристики та області застосування для визначення атомного складу фаз.</p> <p>12. Спектроскопія характеристичних втрат енергії непружно розсіяних електронів. Методики дослідження характеристичних втрат непружно розсіяних електронів. Области їх використання та обмеження.</p> <p>13. Ультрафіолетова спектроскопія. Области її застосування.</p> <p>14. Вивчення зовнішніх та внутрішніх електронних оболонок атомів і молекул та розподілу електронів у зоні провідності твердого тіла.</p> <p>15. Фотоелектронна спектроскопія. Характеристика методу та області його застосування в хімії.</p> <p>16. Рентгенівська фотоелектронна спектроскопія.</p> <p>17. Ультрафіолетова фотоелектронна спектроскопія. Порівняння різних видів фотоелектронної спектроскопії, їхніх можливостей та областей використання.</p> <p>18. Електронно-коливальна спектроскопія, її характеристика та основні області застосування.</p> <p>19. Метод енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (ЕДС) – варіант рентгеноспектрального аналізу. Використання ЕДС як аналітичного методу елементного складу твердої речовини. Використання методу ЕДС при дослідженні об'єктів в скануючому електронному та трансмісійному електронному мікроскопі. Основні компоненти установки ЕДС. Види детекторів, що використовуються в методі ЕДС, їхні переваги та обмеження. Точність методу ЕДС.</p> <p>20. Використання електронної мікроскопії у Львівському національному університеті імені Івана Франка. Наукове обладнання лабораторії електронної мікроскопії науково-технічного і навчального центру низько-температурних досліджень. Основні характеристики та можливості використання растрового електронного мікроскопа-аналізатора РЕММА-102-02.</p> <p>21. Наукове обладнання центру колективного користування науковим обладнанням Лабораторії матеріалознавства інтерметалічних сполук. Основні характеристики та можливості використання скануючого електронного мікроскопа Tescan Vega 3 LMU у наукових дослідженнях.</p>
<b>Опитування</b>	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Таблиця 1. Схема курсу

Тиждень	Тема, план	Форма діяльності	Література. ***Ресурси в інтернеті	Завдання	Термін виконання
1-3	Тема 1. Проблема дослідження структури та складу матеріалів. Електронна теорія твердого тіла. Електронна спектроскопія, її значення у дослідженні твердих тіл. Види електронної спектроскопії, їх класифікація та основні характеристики.	Лекції, практичні заняття	<b>Базова:</b> 1. Немошкаленко В. В., Алешин В. Г. <i>Электронная спектроскопия кристаллов.</i> Киев: Наукова думка, 1983. – 283 с. 2. Немошкаленко В. В. <i>Рентгеновская эмиссионная спектроскопия металлов и сплавов.</i> Киев: Наукова думка, 1972. – 318 с.	семинар	лютий
4-5	Тема 2. Молекулярна електронна мікроскопія. Зворотна емісійна спектроскопія. Ізохромна спектроскопія. Спектроскопія гальмівного випромінювання.	Лекції, практичне заняття	3. Каробовский В.Л., Шпак А. П. <i>Рентгеновская и электронная спектроскопия.</i> Киев: Наукова думка, 2010. – 214 с.	семинар	березень

6-7	Тема 3. Оже-електронна спектроскопія – метод дослідження електронної структури.	Лекції, практичне заняття	4. Калмыков Б., Дмитриева Н. Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный анализ неорганических материалов: методическое пособие для студентов хим. Фак-та МГУ им. М. В. Ломоносова. Москва: изд-во МГУ им. М.В. Ломоносова, 2017. 5. Пентин Ю. А., Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии. Москва: Мир, 2006. – 683 с. 6. Шишкин А. М. Взаимодействие фотонов и электронов с твердым телом. Санкт- Петербург: ВВМ, 2008. 7. Карлсон Т. А. Фотоэлектронная и Оже-спектроскопия. Ленинград: Машиностроение, 1981. – 431 с. 8. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ. Москва: Мир, 1984.	семинар	березень-квітень
8-10	Тема 4. Вивчення зовнішніх та внутрішніх електронних оболонок атомів і молекул та розподілу електронів у зоні провідності твердого тіла.	Лекції, практичні заняття	<b>Допоміжна:</b> 1. Біленко І. І. Фізичний словник. Київ: Вища школа, 1979. – 336 с. 2. Зигбан К., Нордлінг К., Фальман А. и др. Электронная микроскопия. Москва: Мир, 1971. – 493 с. 3. Количественный электронно-зондовый микроанализ. Москва: Мир, 1986. 4. Hüfner S. Photoelectron Spectroscopy. Principles and applications. 3 <sup>rd</sup> edn. Berlin: Springer, 2003. <b>***Інформаційні ресурси:</b> 1. [Електронний ресурс] <a href="http://chem.libretexts.org">http://chem.libretexts.org</a> 2. [Електронний ресурс] <a href="http://centres.lnu.edu.ua/low-temperature-studies">http://centres.lnu.edu.ua/low-temperature-studies</a>	підготовка зразків для досліджень	квітень
11-14	Тема 5. Рентгенівська фотоелектронна спектроскопія та її застосування для дослідження твердих тіл. Рентгеноспектральний мікроаналіз. Енергодисперсійна рентгенівська спектроскопія.	Лекції, практичні заняття		підготовка реферату	травень
15-16	Тема 6. Використання електронної мікроскопії для вивчення твердого тіла у Львівському національному університеті імені Івана Франка.	Лекції, практичні заняття			