


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.

Назва курсу	Методи визначення електронної структури
Адреса викладання курсу	Хімічний факультет ЛНУ імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 6
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Хімічний факультет Кафедра неорганічної хімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки 102 Хімія
Викладач курсу	Котур Богдан Ярославович, д.х.н., професор
Контактна інформація викладача	bohdan.kotur@lnu.edu.ua
Консультації по курсу відбуваються	За домовленістю з аспірантами за їхньої потреби
Сторінка курсу	https://chem.lnu.edu.ua/academics/postgraduates
Інформація про курс	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
Коротка анотація курсу	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
Мета та цілі курсу	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.
Література для вивчення дисципліни	Базова: 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>Допоміжна:</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. 3rd edn. Berlin: Springer, 2003.</p> <p>Інформаційні ресурси:</p> <p>1. [Електронний ресурс] http://chem.libretexts.org</p> <p>2. [Електронний ресурс] http://centres.lnu.edu.ua/low-temperature-studies</p>
Тривалість курсу	90 год
Обсяг курсу	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)
Очікувані результати навчання	<p>У результаті вивчення курсу аспірант буде</p> <p>знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> - фізичні принципи процесів, що відбуваються у твердому тілі при взаємодії з рентгенівським випромінюванням; - класифікацію електронних та рентгенівських спектрів твердих тіл; - основи зонної теорії твердих тіл; - основні методи досліджень, що використовуються в електронній спектроскопії; - <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> - володіти стандартною термінологією, що використовується для визначення ключових понять дисципліни; - орієнтуватися у доборі сучасної наукової літератури з електронної та рентгенівської спектроскопії та самостійно працювати з нею; - добирати необхідний комплекс методик електронної та рентгенівської спектроскопії для вирішення конкретних дослідницьких завдань; - якісно і кількісно інтерпретувати результати вивчення електронної структури неорганічних речовин і матеріалів.
Ключові слова	Тверде тіло, електронна структура, методи визначення
Формат курсу	Очний, заочний аудиторні заняття та самостійна робота
Теми	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.

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

	<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>
Опитування	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	Базова: 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.	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. Рентгеновская и электронная спектроскопия. 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.	семінар	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	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.	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	8. Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ. Москва: Мир, 1984. Допоміжна: 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.	підготовка реферату	травень
15-16	Тема 6. Використання електронної мікроскопії для вивчення твердого тіла у Львівському національному університеті імені Івана Франка.	Лекції, практичні заняття	4. Hüfner S. Photoelectron Spectroscopy. Principles and applications. 3 rd edn. Berlin: Springer, 2003. ***Інформаційні ресурси: 1. [Електронний ресурс] http://chem.libretexts.org 2. [Електронний ресурс] http://centres.lnu.edu.ua/low-temperature-studies		