

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

Физический факультет
Кафедра физических методов исследования твёрдого тела



Рабочая программа дисциплины
МЕТОДЫ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Направление подготовки: **03.04.02 Физика**

Направленность (профиль): **Физика. Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения **Очная**

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная ра- бота, не включая пе- риод сессии	Самостоятельная подготовка к проме- жуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференциро- ванный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	72	32			18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётные единицы, из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Ответственный за образовательную программу
д.ф.-м.н., проф.

С. В. Цыбуля

Новосибирск, 2026

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	4
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.	5
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	5
5. Перечень учебной литературы.	7
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	7
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.....	7
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	7
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	8
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	8

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Курс Методы высокоэнергетической спектроскопии предназначен для обучения студентов-физиков применению различных спектроскопических методик, использующих высокоэнергетические пучки частиц, к решению актуальных задач физики твердого тела и материаловедения:

Методы высокоэнергетической спектроскопии (рентгеновская, рентгеноэлектронная, оже- и мессбауэровская спектроскопии) являются эффективными методами изучения электронного и пространственного строения твердых тел.

Рентгеновская эмиссионная и абсорбционная спектроскопия (в том числе с использованием источников синхротронного излучения) в настоящее время широко используются для проведения количественного и качественного состава веществ и материалов, для изучения пространственной структуры конденсированных сред, включая аморфные вещества и жидкости.

Рентгеноэлектронная и оже-спектроскопия являются наиболее информативными методами исследования состояния поверхности, приповерхностных и переходных слоев в материалах различной природы, соответствующие методы позволяют получать ценную информацию о химическом состоянии отдельных атомов в составе молекул, кластеров, кристаллических фаз.

Мессбауэровская спектроскопия позволяет изучать особенности магнитного, электронного, геометрического состояния атомов в разнообразных соединениях и материалах.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Знать основы теоретического описания электронного строения атомов, молекул, твердых тел; базовую терминологию описания атомного строения кристаллических и аморфных веществ; основные каналы взаимодействия с веществом электромагнитного излучения различных спектральных диапазонов, электронов, нейтронов, тяжелых заряженных частиц; современные методы и приближения квантовой механики, используемые для расчета электронной структуры атомов и молекул, а также зонной структуры твердых тел; экспериментальные методы определения энергетического спектра занятых и вакантных состояний, их атомных и орбитальных составляющих. Уметь планировать спектроскопический эксперимент, оптимальным образом выбирать используемый метод, методическую разновидность или их комбинацию, подбирать режим работы оборудования (монохроматора, линз, детектора и

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		пр.); интерпретировать экспериментальные спектры с целью получения необходимой информации об особенностях электронного или атомного строения изучаемых объектов и сопоставлять полученные данные с результатами теоретических расчетов электронного строения изучаемых объектов. Владеть навыками применения экспериментальных спектроскопических методов для решения поставленных научных задач; программами обработки экспериментальных спектров, способами анализа ошибок экспериментальных данных; базами рентгеноспектральных и рентгеноэлектронных данных по энергиям спектрального перехода и энергиями внутренних уровней; базами данных по учету необходимых поправок при проведении количественных анализов на основе рентгеновских эмиссионных спектров, рентгеноэлектронных спектров.

При подаче материала лекционного курса используется мультимедийная техника. На экран выводятся определения, основные понятия, а также графические иллюстрации, помогающие наглядно и последовательно изложить лекционных материал. Всюду, где это допускается уровнем знаний и подготовки студентов, материал лекционного курса увязывается с современными исследованиями в передовых отечественных и в мировых установках мегасайенс. Специально указываются темы, активно обсуждаемые и дебатированные в актуальной профессиональной научной литературе и включенные в планы исследовательских работ в институтах, в которых студенты проходят научную практику.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Курс «Методы высокоэнергетической спектроскопии» требует предварительной подготовки студентов по таким разделам физики, как квантовая механика, электродинамика, физическая химия, а также по математике (теория групп, специальные функции математического анализа, линейная алгебра).

Курс дает магистранту необходимые знания и практические навыки в области выбора спектроскопического метода и реализующего его прибора для изучения электронной и пространственной структуры различных веществ и материалов в рамках подготовки его магистерской диссертации.

3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Трудоёмкость дисциплины составляет: 2 зачётные единицы, 72 часа.

Форма промежуточной аттестации: 3 семестр – экзамен

№	Вид деятельности	Семестр
		3
1	Лекции, ч	32
2	Практические занятия, ч	-
3	Лабораторные занятия, ч	-
4	Занятия в контактной форме, ч из них	36
5	аудиторных занятий, ч	32
6	в электронной форме, ч	-
7	консультаций, час.	2
8	промежуточная аттестация, ч	2
9	Самостоятельная работа, час.	36
10	Всего, ч	72

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Программа и основное содержание лекций (32 часа)

Лекция 1. Введение в спектроскопию. Понятие о спектроскопии и резонансе. Задачи спектроскопии в исследовании твердого тела (химический состав, атомная структура, электронная структура). Классификация видов спектроскопии: по постановке эксперимента (поглощение, испускание, неупругое рассеяние и пр.); по типу исследуемого объекта (атомная спектроскопия, молекулярная спектроскопия, спектроскопия твердого тела); по типу используемого излучения. Понятие о спектроскопии *in situ* и *operando*. **(2 часа)**

Лекция 2. Теоретические основы спектроскопии. Квантовая теория строения атома, энергетические уровни электрона в атоме, водородоподобный атом, спин-орбитальное и спин-спиновое взаимодействие, LS- и jj-связь. Рентгеновские термы, классификация, основные направления распада (рентгеновская флуоресценция и Оже-процесс), их квантовые выходы, связь времени жизни основного-дырочного состояния с энергетической (естественной) шириной уровня. Основные термины и подходы к описанию электронной структуры, атомной структуры твердых тел. Взаимодействие электромагнитного излучения разных спектральных диапазонов, электронов, нейтронов с веществом: каналы взаимодействия, количественные характеристики, особенности. **(3 часа)**

Лекция 3. Основные компоненты спектроскопических приборов. Источники излучения, коллимирующие и фокусирующие оптические элементы, системы образца (высоко- и низкотемпературные ячейки, камеры высокого давления, ячейки для создания электрических и магнитных полей), оборудование для работы со сверхвысоким вакуумом, детекторы, системы реального времени для синхронизации событий. **(2 часа)**

Лекция 4. Мессбауэровская спектроскопия. Оболочечная модель ядра, спин ядра, четно-нечетные и нечетно-нечетные ядра. Физические основы мессбауэровской (гамма-резонансной) спектроскопии. Реализация мессбауэровской спектроскопии с изотопными источниками (различные режимы реализации, включая поглощение, отражение, рассеяние, эмиссия, внутренняя конверсия). Источники информации в спектрах (изомерный сдвиг, квадрупольное расщепление, сверхтонкое магнитное расщепление). Особенности реализации мессбауэровской спектроскопии на синхротронных источниках (ядерное фронтальное рассеяние, NFS). Ядерное неупругое рассеяние, реализация методики неупругого рентгеновского рассеяния высокого разрешения с использованием резонансной брегговской монохроматизации. **(3 часа)**

Лекция 5. Рентгеноэмиссионная спектроскопия. Физические основы рентгеноэмиссионной спектроскопии. Рентгенофлуоресцентный анализ (энерго-дисперсионный и волно-дисперсионный режимы). Рентгеноэмиссионная спектроскопия высокого разрешения: инструментальная реализация (схемы Иоганна и фон Хамоса), источники информации в спектрах, примеры приложений рентгеноэмиссионной спектроскопии мягкого и жесткого диапазонов. Методические разновидности рентгеноэмиссионной спектроскопии: резонансное неупругое рентгеновское рассеяние (RIXS), HERFD-XAFS, рентгеновское рамановское рассеяние. Рентгеноэмиссионная спектроскопия с нерентгеновским возбуждением. **(5 часов)**

Лекция 6. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Физические основы фотоэлектронной спектроскопии, внешний фотоэффект, формула Эйнштейна. Типы основных и спутниковых линий в фотоэлектронных спектрах. Устройство фотоэлектронного спектрометра. Особенности реализации фотоэлектронной спектроскопии на синхротронных источниках, управление эффективной глубиной анализа, использование резонансных эффектов. Источники информации в спектрах, примеры приложений. Основные приемы работы со спектрами, формы линий, формы фонового сигнала. Методические разновидности фотоэлектронной спектроскопии: ARPES, HAXPES, NAP-XPS, PEEM. Оже-электронная спектроскопия. Спектроскопия обратной фотоэмиссии и ее разновидности. **(5 часов)**

Лекция 7. Рентгеноабсорбционная спектроскопия XAFS. Физические основы, возможные схемы детектирования и их области применения, инструментальная реализация. Особенности реализации на лабораторных приборах. Программы обработки данных. Основы обработки спектров, основные этапы предобработки, Фурье-преобразование кривой нормализованного EXAFS, моделирование и нелинейная подгонка. Теоретическое моделирование XANES, метод главных компонент, разложение экспериментального спектра в линейную комбинацию реперных спектров, метод многомерной интерполяции. Особенности рентгеноабсорбционной спектроскопии в мягкой области NEXAFS. Использование линейной и круговой поляризации, явление дихроизма. Примеры приложений для исследований твердого тела. **(5 часов)**

Лекция 8. Спектральные эффекты в дифракционных методах. Теоретические основы резонансного рассеяния, действительная и мнимая части аномально-дисперсионных поправок к атомному фактору рассеяния, соотношение Крамерса-Кронига. Понятие об элементном и валентном контрасте. Использование резонансной дифракции в рентгеноструктурном анализе монокристаллов, в белковой кристаллографии (аномальная дифракция на нескольких длинах волн, MAD), в порошковой дифракции, малоугловом рассеянии, методе парных функций распределения. Основы метода тонкой структуры аномальной дифракции (DAFS). **(5 часов)**

Лекция 9. Прочие виды высокоэнергетической спектроскопии. Гамма-спектрометрия. Нейтронная спектроскопия (нейтрон-активационный анализ, неупругое нейтронное рассеяние, нейтронное спин-эхо). Спектроскопические методы с использованием электронов (спектроскопия характеристических потерь энергии электронов), позитронов (спектроскопия времени жизни позитрония до аннигиляции PALS), протонов, мюонов (спектроскопия вращения спина мюона μ SR) и др. Особенности аппаратной реализации и области применения **(2 часа)**

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	9
Подготовка сообщений	9
Подготовка к экзамену	18

5. Перечень учебной литературы.

1. Г. В. Фетисов. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. Физматлит, Москва, 2007, ISBN 978-5-9221-0805-8 (6 экз.)
2. Рентгеноспектральный метод изучения структуры аморфных тел. EXAFS-спектроскопия. (Под ред. Г.М. Жидомирова), Наука, Новосибирск, 1988., ISBN 5-02-029190-0 (1 экз.)

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

3. Г. В. Фетисов. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. Физматлит, Москва, 2007.
4. Рентгеноспектральный метод изучения структуры аморфных тел. EXAFS-спектроскопия. (Под ред. Г.М. Жидомирова), Наука, Новосибирск, 1988.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

- научные библиографические базы данных Web of Science, Scopus.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

В рамках курса предполагается использование свободно распространяемого программного пакета обработки рентгеноабсорбционных спектров Demeter (<https://bruceravel.github.io/demeter/>).

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется в ходе семестра путем проведения выборочных опросов и в форме заслушивания сообщений, самостоятельно подготовленных магистрантами по заданным темам и доложенных на занятиях.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в области высокоэнергетической спектроскопии в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию по билетам в устной форме. Вопросы билета подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Таблица 10.1

Код компетенции	Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочное средство
ПК-1	ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования. ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Знать основы теоретического описания электронного строения атомов, молекул, твердых тел; базовую терминологию описания атомного строения кристаллических и аморфных веществ; основные каналы взаимодействия с веществом электромагнитного излучения разных спектральных диапазонов, электронов, нейтронов, тяжелых заряженных частиц; современные методы и приближения квантовой механики, используемые для расчета электронной структуры атомов и молекул, а также зонной структуры твердых тел; экспериментальные методы определения энергетического спектра занятых и вакантных состояний, их атомных и орбитальных составляющих. Уметь планировать спектроскопический эксперимент, оптимальным образом выбирать используемый метод, методическую разновидность или их комбинацию, подбирать режим работы оборудования (монокроматора, линз, детектора и пр.); интерпретировать экспериментальные спектры с целью получения необходимой информации об особенностях электронного или атомного строения изучаемых объектов и сопоставлять полученные данные с результатами теоретических расчетов электронного строения изучаемых объектов. Владеть навыками применения экспериментальных спектроскопических методов для решения поставленных научных задач; программами обработки экспериментальных спектров,	Заслушивание сообщений студентов, экзамен

		способами анализа ошибок экспериментальных данных; базами рентгеноспектральных и рентгеноэлектронных данных по энергиям спектрального перехода и энергиями внутренних уровней; базами данных по учету необходимых поправок при проведении количественных анализов на основе рентгеновских эмиссионных спектров, рентгеноэлектронных спектров.	
--	--	--	--

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Методы высокоэнергетической спектроскопии».

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Шкала оценивания
<u>Экзамен:</u> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, – точность и корректность применения терминов и понятий, – наличие исчерпывающих ответов на дополнительные вопросы. При изложении ответа на вопрос(ы) преподавателя обучающийся мог допустить не принципиальные неточности.	<i>Отлично</i>
<u>Экзамен:</u> – самостоятельность, осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность изложения материала, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок, – наличие полных ответов на дополнительные вопросы с возможным присутствием ошибок.	<i>Хорошо</i>

Экзамен: – самостоятельность и осмысленность в изложении материала, наличие ошибок в логике и аргументации, а также затруднений при формулировке собственных суждений, – корректность применения терминов и понятий, с множественными ошибками, – наличие неполных и/или содержащих существенные ошибки ответов на дополнительные вопросы.	Удовлетворительно
Экзамен: – отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала, – грубые ошибки в применении терминов и понятий, – отсутствие ответов на дополнительные вопросы.	Неудовлетворительно

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Примеры тем сообщений и контрольных вопросов:

1. Заполнить таблицу спектроскопических методик, использующих в качестве частицы-зонда рентгеновский фотон, а в качестве частицы-отклика электрон; заряженные ионы и в качестве частицы-зонда, и в качестве частицы-отклика
2. Привести примеры спектроскопических методик, в которых частица-зонд исчезает (распадается)
3. Сравнить наиболее вероятные каналы взаимодействия электронов и нейтронов с веществом
4. Провести сравнительный анализ спектроскопических методик, используемых для количественного элементного анализа (рентгенофлуоресцентный анализ, EDX, нейтрон- или протон-активационный анализ, вторично-ионная масс-спектрометрия, спектроскопия ионного рассеяния)
5. Описать режимы работы газового детектора интенсивности рентгеновского излучения (ионизационная камера, пропорциональный счетчик, счетчик Гейгера).
6. Проанализировать недостатки и преимущества использования белого излучения по сравнению с монохроматическим для разных спектроскопических методик.
7. Какую дополнительную информацию можно извлечь путем варьирования полярного или азимутального угла сбора фотоэлектронов относительно поверхности исследуемого образца.
8. Проинтерпретировать изменения в рентгеноэмиссионном при переходе от режима нерезонансного возбуждения к резонансному.
9. Привести примеры важности учета эффектов многократного рассеяния в спектрах EXAFS.
10. Предложить научную задачу, которую можно решить с использованием рентгеновского рамановского рассеяния.
11. Описать возможности метода спектроскопии аннигиляции позитрония в исследованиях пористой структуры

12. Описать возможности метода спектроскопии вращения спина мюона в исследовании локальной магнитной структуры материалов.

Примерные вопросы на экзамен

1. Энергетические уровни водородоподобного атома, квантовые числа
2. Характер спин-орбитального расщепления электронных уровней s,p,d-характера в рамках jj-связи
3. Основные приближения, используемые в современных программах обработки спектров EXAFS, теория полного многократного рассеяния
4. Квантово-механические подходы для расчета рентгеноэмиссионного спектра
5. Порядок заполнения нуклонных уровней в рамках оболочечной модели ядра, «магические» изотопы.
6. Способы генерации пучков поляризованных мюонов.

-
1. Определение зарядового состояния атома в образце по рентгеноабсорбционному спектру.
 2. Отнесение компонент в фотоэлектронном спектре основного уровня C1s для органического материала.
 3. Интерпретация мессбауэровского спектра с дуплетной/секступлетной линией
 4. Источники информации в спектрах магнитного кругового дихроизма
 5. Типы оптических схем рентгеновских спектрометров
 6. Типы детекторов для электронных спектрометров.

Пример экзаменационного билета

1. Основные приближения, используемые в современных программах обработки спектров EXAFS, теория полного многократного рассеяния.
2. Типы детекторов для электронных спектрометров.

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.