МЕТОДЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОМАТЕРИАЛОВ И НАНОСТРУКТУР

ЛЕКЦИЯ 06

Электронная спектроскопия: XPS, UPS и AES

Поверхностная химия, валентные состояния и энергия связи

Кратко: В электронной спектроскопии информацию о веществе получают по энергиям испускаемых электронов.

Цель лекции и ожидаемые результаты

Понимать

Объяснить: Идея электронной спектроскопии. В электронной спектроскопии информацию о веществе получают по...

Сопоставлять

Объяснить: Оценка атомных концентраций. Площади линий корректируют с помощью относительных коэффициентов...

Применять

Объяснить: Достоверное представление результатов. В публикации указывают источник возбуждения, энергетический шаг, фон и...

В этой лекции научные определения связываются с измеряемыми величинами, схемами и примерами обработки данных.

Идея электронной спектроскопии

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 01 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

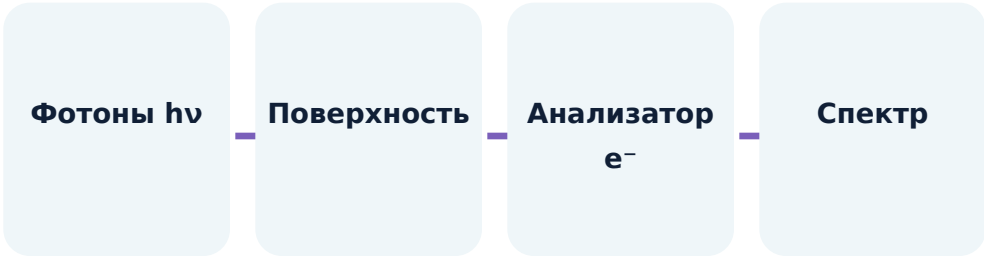
В электронной спектроскопии информацию о веществе получают по энергиям испускаемых электронов.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Из-за малой длины свободного пробега методы обычно чувствительны к приповерхностным слоям.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Принцип работы XPS

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 02 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Рентгеновский фотон выбивает электрон, энергия которого измеряется анализатором.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Спектр позволяет определять элементы и различать некоторые химические состояния.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Энергетическое уравнение XPS

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 03 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Энергия связи вычисляется по энергии фотона и измеренной кинетической энергии.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

При энергетической калибровке учитывают рабочую функцию анализатора.

СООТНОШЕНИЕ

$$E_B = h\nu - E_{kin} - \Phi_{an}$$



Разложение пиков (модель) МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Обзорный XPS-спектр

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 04 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Обзорный спектр используют для поиска элементов и выбора областей высокого разрешения.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Чувствительность по элементам и глубине не одинакова.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



Разложение пиков (модель) МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Высокоразрешающий XPS

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 05 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Тонкая структура линии и химический сдвиг помогают различать состояния элемента.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

При фитировании следует сохранять физически обоснованные ограничения на пики.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



Разложение пиков (модель) МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Оценка атомных концентраций

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 06 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Площади линий корректируют с помощью относительных коэффициентов чувствительности.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Результат отражает область анализа и не всегда равен объёмному составу материала.

СООТНОШЕНИЕ

$$C_i = (A_i/S_i)/\Sigma(A_j/S_j) \times 100\%$$



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

UPS: валентные состояния

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 07 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

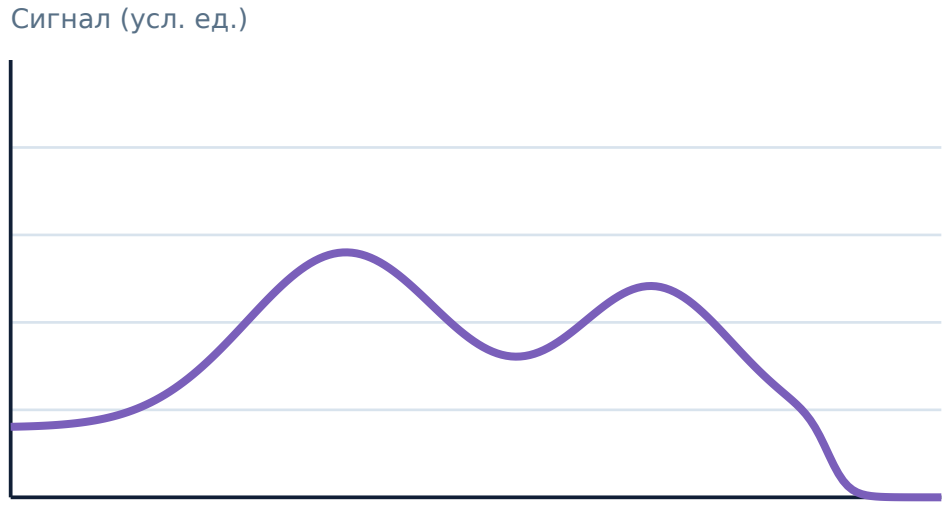
UPS применяют для исследования состояний около уровня Ферми и работы выхода.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Для интерпретации необходима корректная привязка энергетической шкалы.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



UPS: уровни и край Ферми МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Работа выхода из UPS

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 08 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

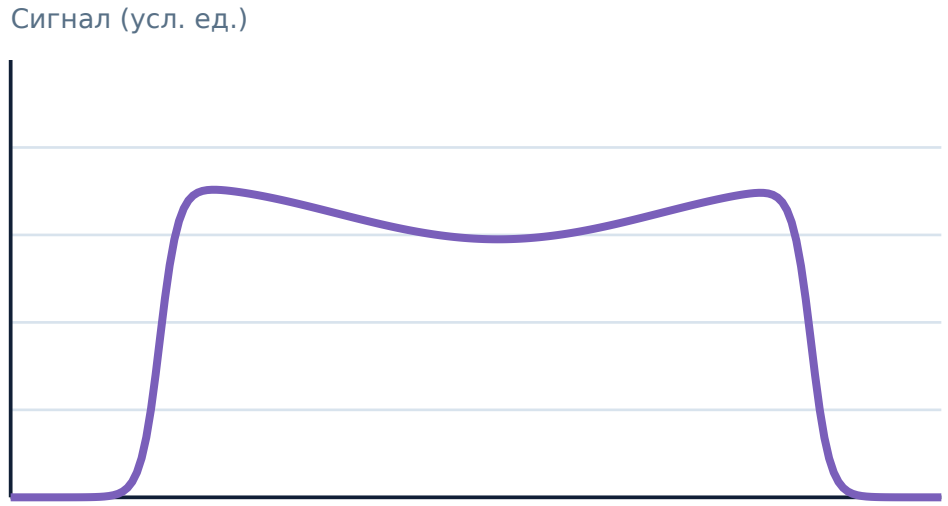
Работу выхода определяют по ширине спектрального диапазона между краем Ферми и вторичным отсечением.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Сдвиг шкалы под напряжением смещения учитывают при обработке данных.

СООТНОШЕНИЕ

$$\Phi = h\nu - \Delta E \quad \text{(при верной шкале)}$$



Вторичный край и уровень Ферми МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Оже-электронная спектроскопия AES

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 09 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Оже-электрон возникает при безызлучательной релаксации атома после образования вакансии.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Кинетические энергии оже-линий позволяют устанавливать элементный состав поверхности.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Структура · состав · свойства



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Сравнение XPS, UPS и AES

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 10 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

XPS чувствителен к химическим состояниям, UPS — к валентным электронам, AES — к элементному составу поверхности.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Выбор метода зависит от физического вопроса и требуемой глубины анализа.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Зарядка и энергетическая калибровка

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 11 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Диэлектрические образцы могут заряжаться и сдвигать положения линий.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Необходимо сообщать способ коррекции зарядки и использованные эталоны.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Условия опыта · повторяемость



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Фитирование XPS-пиков

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 12 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

Форма линии, фон и соотношения компонент выбираются на физической основе.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Число компонент не следует увеличивать только ради уменьшения невязки.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Структура · состав · свойства



Разложение пиков (модель) МОДЕЛЬ / СХЕМА

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Достоверное представление результатов

КЛЮЧЕВЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ · 13 / 13

ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ

В публикации указывают источник возбуждения, энергетический шаг, фон и параметры фитирования.

ОБРАТИТЕ ВНИМАНИЕ

Химическое состояние подтверждают согласованным анализом нескольких линий.

ПРАКТИЧЕСКИЙ КОНТЕКСТ

Измерение · калибровка · вывод



ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ОПЕРАЦИЙ

Схема или расчётная кривая; не реальные измерения.

Разбор расчётного примера: Энергия связи в XPS

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Al Kα: hν = 1486,6 эВ; E_kin = 1197,3 эВ; Φ_an = 4,5 эВ.

РЕШЕНИЕ

E_B = 1486,6 − 1197,3 − 4,5 = 284,8 эВ.

КАК ПОНИМАТЬ РЕЗУЛЬТАТ

Определение предполагает корректную энергетическую калибровку анализатора.

Итоги лекции: главные выводы

Принцип

Энергия связи вычисляется по энергии фотона и измеренной кинетической энергии. При энергетической калибровке...

Применение

Работу выхода определяют по ширине спектрального диапазона между краем Ферми и вторичным отсечением. Сдвиг шкалы...

Ограничения

В публикации указывают источник возбуждения, энергетический шаг, фон и параметры фитирования. Химическое состояние...

Главный итог: обоснованный научный вывод требует корректной физической модели и проверки измерений.

Контрольные вопросы и литература

ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОПРОВЕРКИ

1. Как вычисляют энергию связи в XPS?
2. Что необходимо для определения работы выхода UPS?
3. Как распознать некорректное фитирование?

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Srinivasan et al. Experimental Techniques, 2024

2. NIST XPS reference and surface analysis literature

Материалы курса, 2026

Самостоятельное задание: назовите измеряемый параметр, предложите метод и укажите возможный источник ошибки.