

## X光室特色和服务亮点

### 安东帕SAXSess MC<sup>2</sup> 小角散射仪配置特色

SAXSess MC<sup>2</sup> 是一款实验室级小角 / 广角 X 射线散射 (SAXS/WAXS) 一体化仪器, 核心特色是无需切换即可同时测 SAXS+WAXS、全真空光路与宽温原位样品兼容, 适合纳米结构、高分子、胶体、生物大分子等研究。

1. 角度覆盖  $2\theta = 0.18^\circ \sim 40^\circ$ , 一次得到小角 (纳米尺度) + 广角 (晶相 / 分子间距) 完整信息。
2. 经典 Kratky 狭缝系统, 低寄生散射、高角分辨率。整个光路真空, 大幅降低空气散射, 提升信噪比。
3. 支持原位变温结构演化、结晶、相变研究。温度范围:  $-30^\circ\text{C}$  至  $300^\circ\text{C}$ , 控温精度  $\pm 0.1^\circ\text{C}$ 。
4. 多类型样品槽: 液体样品槽, 微量样品兼容, 粉末 / 粘性样品槽, 流动 / 反应样品槽。样品量要求极低, 固体: 几毫克, 液体: 低至  $10\mu\text{L}$ 。

### 安东帕SAXSess MC<sup>2</sup> 小角散射仪测试项目及应用

可测样品类型 (全覆盖)

- 液体 / 溶液: 胶体、乳液、表面活性剂、蛋白质 / 核酸溶液、高分子溶液、悬浮液等
- 固体: 粉末、块体、薄膜、纤维、水凝胶、多孔材料 (MOF、分子筛、碳材料)、催化剂、金属 / 合金等
- 复合材料: 聚合物基复合材料、共混物、嵌段共聚物等

典型测试项目与应用

#### ● 1. 纳米颗粒与分散体系

颗粒 / 胶束: 尺寸、分布、形貌、聚集状态、稳定性、成核 / 生长

多孔材料: 孔径分布、孔形貌、比表面积、孔壁结构

#### ● 2. 高分子与软物质

聚合物: 结晶度、片晶尺寸 / 分布、取向、链构象、相分离、嵌段共聚物周期结构

液晶 / 凝胶: 有序结构尺寸、取向、相行为、凝胶网络

#### ● 3. 生物大分子

蛋白质 / 核酸: 溶液构象、尺寸、聚集、分子量、复合物结构

#### ● 4. 薄膜与表面

薄膜 / 涂层: 表面粗糙度、界面结构、纳米畴、取向、厚度分布

#### ● 5. 原位与动态过程

温度:  $-30 \sim 300^\circ\text{C}$  结构演化、结晶 / 熔融、玻璃化转变

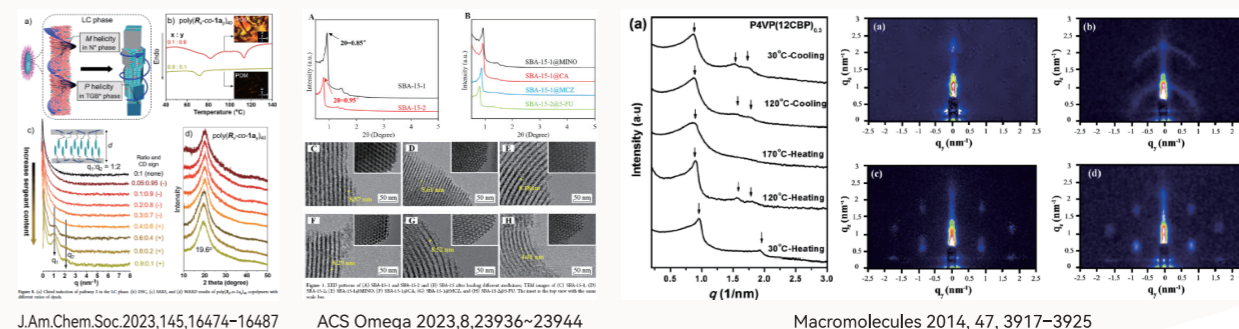
### 安东帕SAXSess MC<sup>2</sup> 小角散射仪技术服务

技术服务特色: 快速、高效、高质量的分析测试服务。

技术方案的制订: 依据客户送检样品的特殊性 & 具体要求, 快速制定有效的实验技术方案并迅速实施。

数据处理及分析: 根据测试结果, 按客户要求可以进行数据处理、作图以及可能的数据分析。1. 扣背景、去模糊化、平滑处理。2. 回转半径计算、颗粒形貌及粒径大小分析、孔分析等。3. 周期性结构的判断及尺寸计算。4. 测试数据的简单模拟计算等。

## 典型案例



### X射线光电子能谱 (XPS) 仪器配置特点

1. 微聚焦单色化 Al K $\alpha$  X 射线源, 分析区域  $20 \sim 900 \mu\text{m}$  可调
2. 深度剖析离子枪, 离子能量  $100 \text{ eV} \sim 4000 \text{ eV}$  连续可调, 束斑直径  $400 \mu\text{m} \sim 1 \text{ mm}$  连续可调
3. 全自动同轴低能电子荷电中和源
4. 可变焦彩色 CCD 摄像头电视显示系统, 能清楚观察样品  $500 \mu\text{m} \sim 3 \text{ mm}$  区域图象

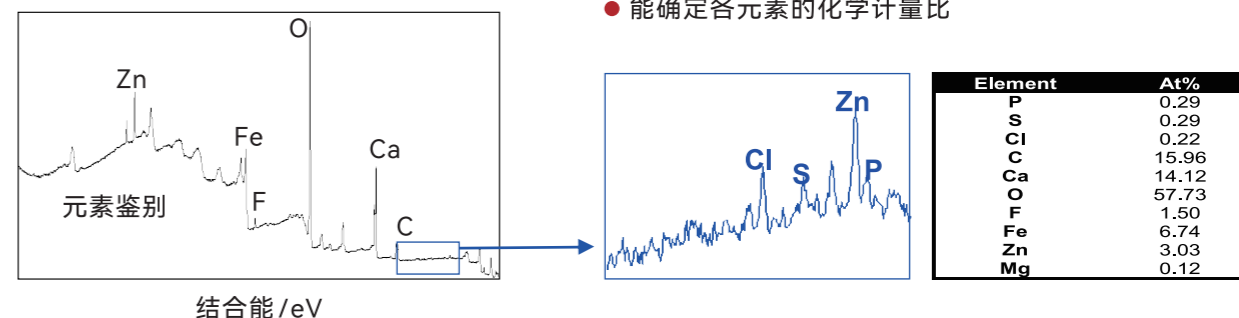
### XPS 测试项目

元素鉴别:

- 存在哪些元素?
- 能检测除 H 和 He 外的所有元素

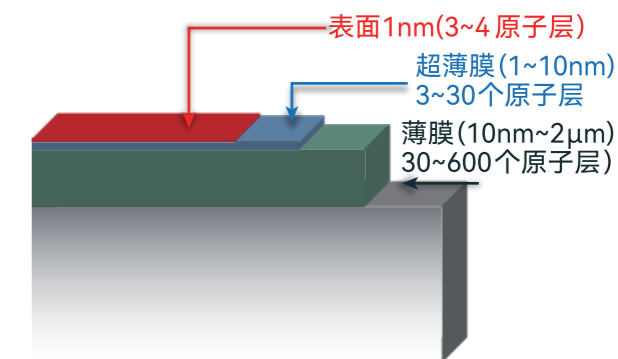
元素的定量分析:

- 各元素的相对含量
- 检测极限  $> 0.1\%$
- 能确定各元素的化学计量比



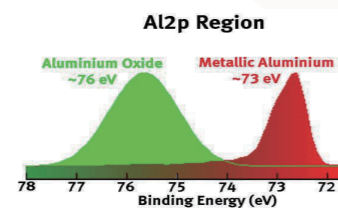
### XPS 测试亮点

1. XPS 表面分析的高灵敏性, 仅分析样品表面几纳米的原子层



## 2. 元素价态识别

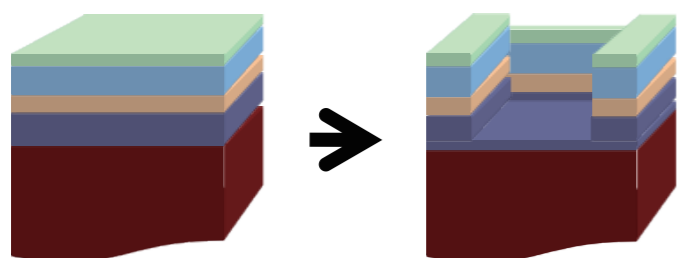
根据同一元素结合能的**化学位移**判断元素价态



由化学位移，识别价态

Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>中Al的结合能与金属Al中的Al结合能相比，明显高。

## 3. XPS深度剖析



XPS的分析深度有限：小于10nm的表面层信号才能被检测到，对于金属则更浅

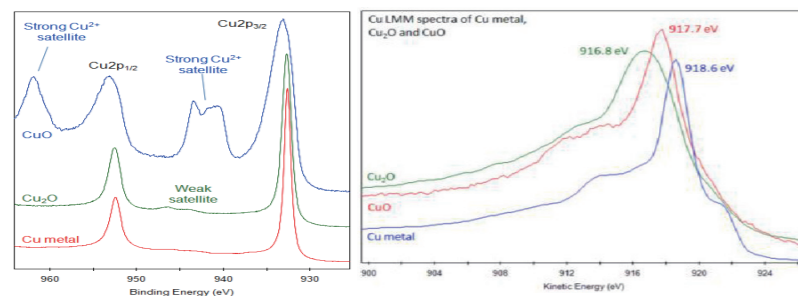
更深处如何检测

采用离子束深度剖析  
每刻蚀一层，可采集一次数据

技术服务特色：

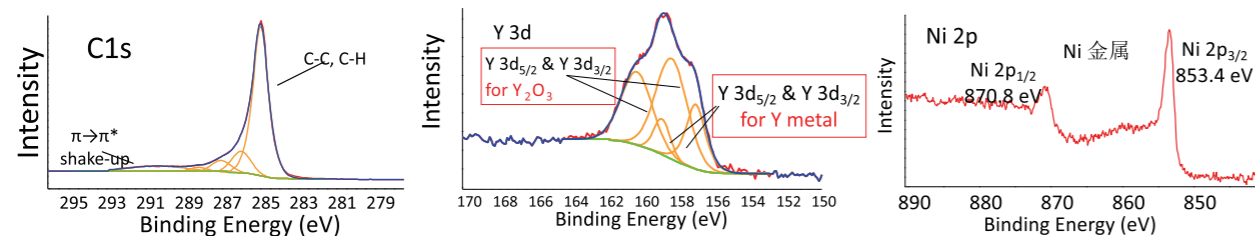
技术方案的制订：依据客户送检样品的特殊性及其具体要求，快速制定有效的实验技术方案并迅速实施。

### 案例一 Cu化学价态的分析



不同价态Cu2p谱峰位移不大，但CuLMM谱峰位移明显，以此判断Cu的价态

### 案例二 含Ni-Y金属催化剂粒子的(SWCNTs) Y包裹Ni的XPS表征



**C:** 以石墨为主    **Y:** Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>与金属Y的混合物    **Ni:** 纯金属镍  
**原因:** Y包裹Ni，所以外层的Y有部分氧化，而Ni被包裹，没有氧化。

## Agilent Gemini Atlas X射线单晶衍射仪-仪器配置

仪器配置特色：

- 1.高灵敏度CCD探测器，有效探测直径135mm，收集大量高分辨率的衍射点；
- 2.kappa四圆测角仪，步进马达定位，四个角度均可自由转动，满足常规晶体结构分析和专业晶体学研究需要；
- 3.晶体样品液氮低温系统，可满足对不同测试温度条件的需求；
- 4.Mo和Cu双光源发生器系统，方便开展有机物绝对构型分析、收集微小晶体衍射数据；
- 5.系统控制和数据处理软件包括控制、维护、数据收集、数据还原和数据分析程序，以及处理孪晶和晶面吸收校正等功能。收集数据和还原数据同步进行。解结构软件直观便捷。可满足各种单晶结构分析需求。

## Bruker D8 QUEST X射线单晶衍射仪-仪器配置

仪器配置特色：

- 1.电荷积分像素阵列CMOS探测器，有效探测面积140 mm× 100mm，非破坏性读取，自适应密集采样；
- 2.三轴测角仪，满足常规晶体结构分析和专业晶体学研究需要；
- 3.晶体样品液氮低温系统，可满足对不同测试温度条件的需求；
- 4.数据收集采用无快门运行模式，有效缩短测试时长；
- 5.微聚焦Mo光源，极大提高微小晶体衍射数据质量；
- 6.仪器操作控制软件包可全自动控制仪器全部操作，进行数据收集、各种校正和条件设置等；晶体结构最新分析软件包，具备自动解析晶体结构及精修功能，可满足各种单晶结构分析需求。

## X射线单晶衍射仪-测试项目

晶体结构分析，从而获得样品的晶系、晶胞参数、空间群、各原子的位置及相应的温度因子，还可获知晶胞内所包含的不对称单元数、晶体密度、原子的连接形式、键长、键角、立体结构和排列堆积情况等信息。

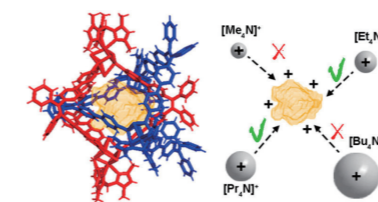
## X射线单晶衍射仪-技术服务

技术服务特色：

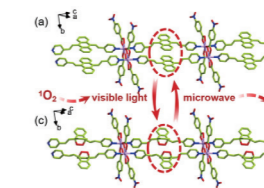
**数据分析：**结合送检样品的具体信息，1) 通过晶体结构的解析，获得样品的晶系、晶胞参数、空间群、各原子的位置及相应的温度因子，还可获知晶胞内所包含的不对称单元数、晶体密度、原子的连接形式、键长、键角、立体结构和排列堆积情况等信息，探索结构与功能的关系；2) 根据单晶解析数据模拟粉末X射线衍射图谱；3) 确定晶体方向。

**技术方案的制订：**依据客户的需求和送检样品的特殊性，制定有效的实验技术方案。

### 典型案例

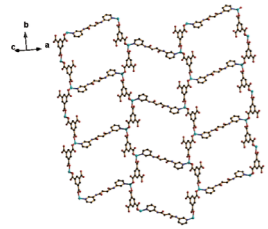


由簇基分子笼构成的三维索烃  
具有尺寸指定性识别能力  
J. P. Lang,\* et al., J. Am. Chem. Soc., 2023, 145,25103-25108.

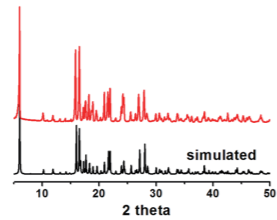


一维双链结构的配位聚合物在可见光和微波介导下，快速捕获和释放单线态氧。  
J. P. Lang,\* et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202306719

模拟粉末X射线衍射图谱，确定物相纯度



配位聚合物  $\{ [Zn(1,3,5-HBTA)(L)_{0.5}(H_2O)] \cdot H_2O \}_n$  的二维网状结构图



实测与模拟粉末X射线衍射图谱

### 布鲁克D8 ADVANCE Plus X射线衍射仪 仪器配置

仪器配置特色:

1. 旋转光管: 在线焦斑和点焦斑应用之间轻松快捷地进行免对准切换;
2. EIGER2 R 500K探测器: Dectris 公司开发的基于混合光子计数技术的新一代探测器, 支持多种模式 (0D / 1D / 2D);
3. 配备TRIO 光路, 可在多达6种不同的光束几何之间进行全自动化电动切换, 无需人工干预, 是所有类型的样品分析的理想之选, 包括粉末、块状材料、纤维、片材和薄膜 (非晶、多晶和外延);
4. 紧凑型尤拉环Plus样品台: 马达驱动Phi轴: 不受限制, 马达驱动Psi轴:  $-5^{\circ}$ 至 $95^{\circ}$ 。

### 布鲁克D8 ADVANCE Plus X射线衍射仪 -技术服务

技术服务特色:

数据分析: 结合送检样品的具体信息,

- 1) 实现谱图的寻峰、分峰拟合等;
  - 2) 对多相混合物的晶相和非晶相进行定量分析;
  - 3) 微观结构分析 (微晶尺寸、微应变、无序...);
  - 4) 热处理或加工制造组件产生的大量残余应力分析;
  - 5) 织构 (择优取向) 分析;
  - 6) 指标化、从头晶体结构测定和晶体结构精修
- 技术方案的制订: 依据客户的需求和送检样品的特殊性, 制定有效的实验技术方案。

### XRD测试项目及应用:

XRD可提供物相、晶体结构、薄膜、微观应力 / 织构等多类测试, 覆盖粉末、块体、薄膜、纤维等样品。

#### 1.物相分析

- 定性分析: 鉴定粉末、块体等多晶材料的物相组成。
- 定量分析: 测定多物相混合物中各相的相对含量。

#### 2.晶体结构参数

- 点阵常数 (晶格参数): 精确测定晶胞参数。
- 晶粒尺寸与晶格畸变: 计算平均晶粒大小、分析晶格应变。
- 结晶度: 计算材料结晶程度。

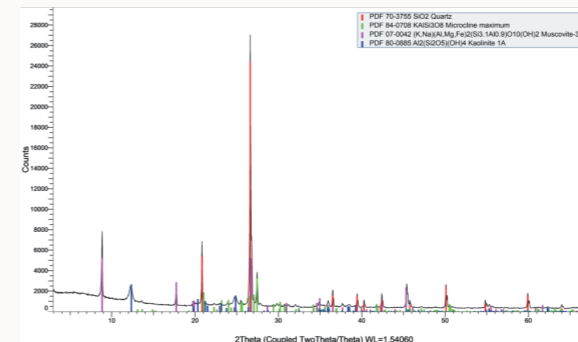
#### 3.薄膜与二维材料分析

- 物相鉴定: 确定薄膜晶相。
- 厚度、密度、粗糙度: 通过 XRR 等方法测定。
- 外延层分析: 晶格失配、应变、弛豫度、倒易空间图 (RSM)。

#### 4.微观结构与织构

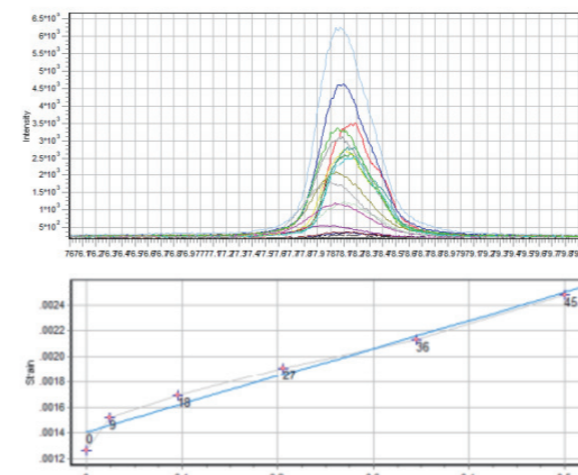
- 残余应力: 测定材料内部应力。
- 织构 (择优取向): 分析晶体取向分布。
- 纤维取向: 高分子纤维、纺织品的结晶取向分析。

### 案例1: 物相定性分析



XRD 物相分析, 是用X 射线衍射来快速确定样品中含有哪些晶体物质, 是材料、化工、地质、制药最常用的“晶体指纹识别”方法。

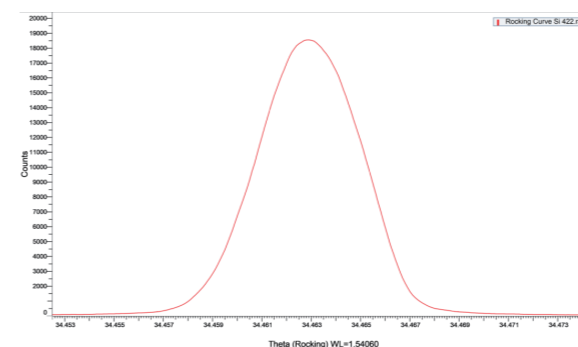
### 案例2: 应力测试 (XRD Stress Measurement)



Material	H	K	L	Wavelength	2Theta	Poisson	Young	S1	1/2 S2	Area
Al	3	1	1	0.1540549	78.225	0.350	69300	-5.051E-6	1.940E-5	1.000

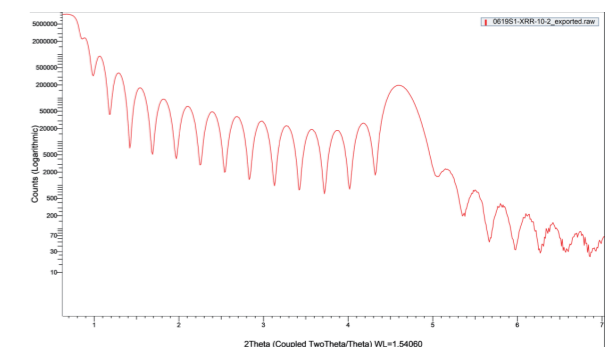
X射线衍射应力测试是一种重要的无损残余应力表征技术。是材料表面完整性评价和工艺优化的关键手段, 特别适合精密零部件的质量控制和失效分析

### 案例3: 摇摆曲线 (Rocking Curve)



X射线摇摆曲线是外延薄膜质量控制的标准手段, 广泛应用于半导体 (GaN、SiC、GaAs)、光电材料 (蓝宝石、金刚石) 等领域, 为优化生长工艺提供关键反馈

### 案例4: 薄膜反射率



X射线薄膜反射率 (XRR) 是纳米薄膜表征的重要技术, 是研究纳米薄膜厚度、密度、粗糙度、界面质量的重要手段。