

HEPHAESTUS

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

Hephæstus
Hephæstus Help

Formulas: compute total cross sections of materials

Materials

- Acetone
- Air
- Alcohol (Ethyl)
- Alcohol (Methyl)
- Alcohol (Propyl)
- Aluminum
- Argon
- Beryllium
- Boron Nitride
- Carbon (Diamond)
- Carbon (Graphite)
- Copper
- Fluorite
- Gold
- Helium
- Iron
- Kapton**
- Kimol
- Krypton
- Lead
- Lead Titanate
- Mica
- Molybdenum
- Mylar
- Neon
- Nitrogen
- Parylene-C
- Parylene-N
- Platinum
- PMMA
- Polycarbonate
- Polymide
- Polypropylene
- Rutile
- Salt
- Sapphire
- Silicon
- Silver
- SiO₂ (Quartz)
- SiO₂ (Silica)
- Tantalum
- Teflon
- Toluene
- Tungsten

Formula C22 H10 O4 N2 **Element**

Density 1.42 g/cm³

Energy 5000

Compute

Results

element	number	barns/atom	cm ² /gm
C	22.000	381.161	19.115
H	10.000	0.702	0.419
N	2.000	731.359	31.443
O	4.000	1272.844	47.905

This weighs 366.316 amu.

Absorption length = 286.6 micron at 5000 eV.

A sample of 1 absorption length with area of 1 square cm requires 40.697 milligrams of sample at 5000.00 eV.

The Elam database and the full cross-sections were used in the calculation.

This calculation uses the Elam data resource and full cross sections.

Formulas中提供了很多常用材料的吸收系数，如上图给出了5keV下 kapton膜的吸收长度为286.6 μ m（每286.6 μ m光强衰减一个e指数）



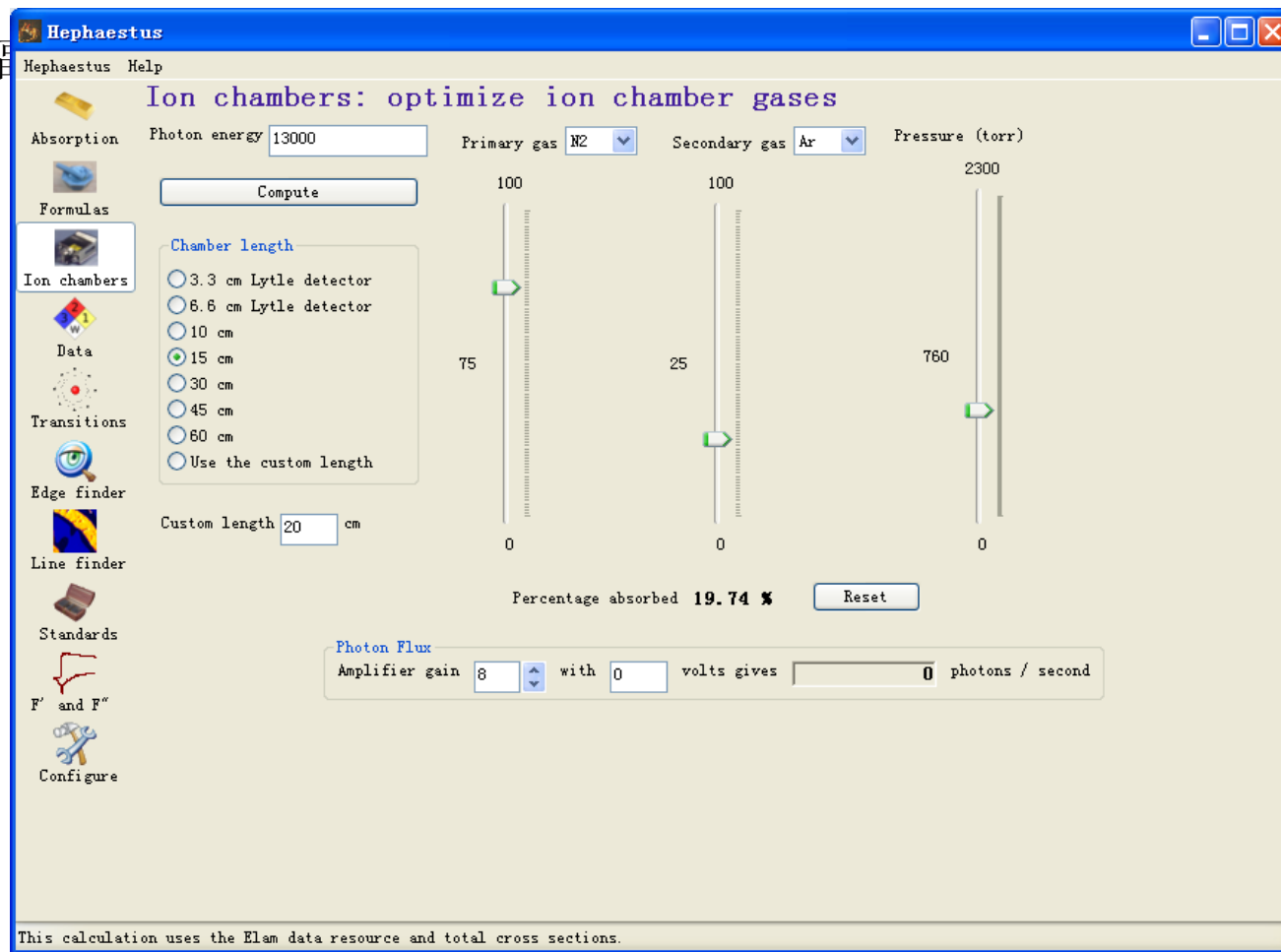
中国科学院高能物理研究所

武汉·2014

HEPHAESTUS

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班



Ion chamber 提供了不同长度电离室在不同能量不同气体下的吸收系数

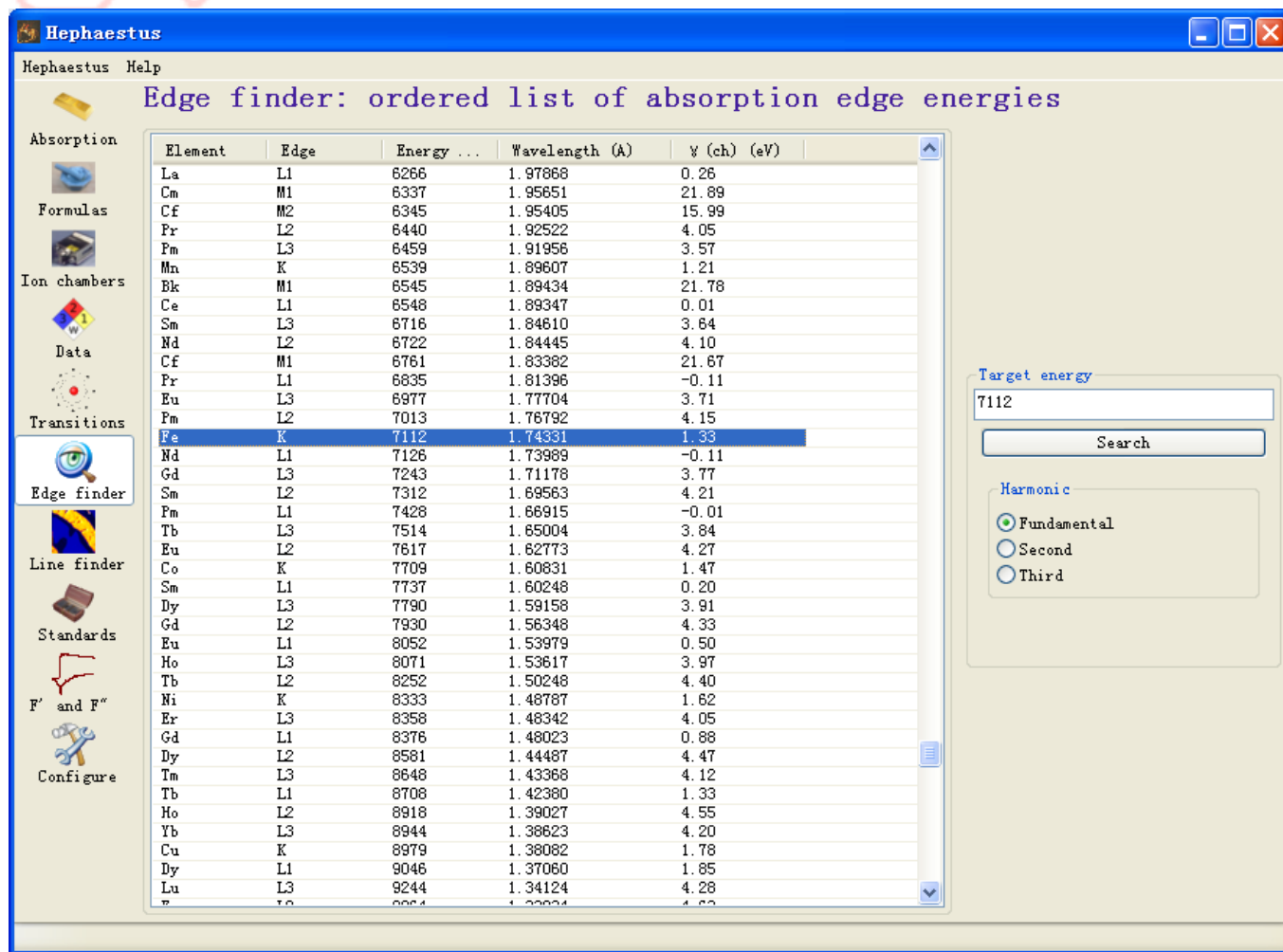


中国科学院高能物理研究所

HEPHAESTUS

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班



Hephæstus
Hephæstus Help

Edge finder: ordered list of absorption edge energies

Element	Edge	Energy ...	Wavelength (Å)	χ (ch) (eV)
La	L1	6266	1.97868	0.26
Cm	M1	6337	1.95651	21.89
Cf	M2	6345	1.95405	15.99
Pr	L2	6440	1.92522	4.05
Pm	L3	6459	1.91956	3.57
Mn	K	6539	1.89607	1.21
Bk	M1	6545	1.89434	21.78
Ce	L1	6548	1.89347	0.01
Sm	L3	6716	1.84610	3.64
Nd	L2	6722	1.84445	4.10
Cf	M1	6761	1.83362	21.67
Pr	L1	6835	1.81396	-0.11
Eu	L3	6977	1.77704	3.71
Pm	L2	7013	1.76792	4.15
Fe	K	7112	1.74331	1.33
Nd	L1	7126	1.73989	-0.11
Gd	L3	7243	1.71178	3.77
Sm	L2	7312	1.69563	4.21
Pm	L1	7428	1.66915	-0.01
Tb	L3	7514	1.65004	3.84
Eu	L2	7617	1.62773	4.27
Co	K	7709	1.60831	1.47
Sm	L1	7737	1.60248	0.20
Dy	L3	7790	1.59158	3.91
Gd	L2	7930	1.56348	4.33
Eu	L1	8052	1.53979	0.50
Ho	L3	8071	1.53617	3.97
Tb	L2	8252	1.50248	4.40
Ni	K	8333	1.48787	1.62
Er	L3	8358	1.48342	4.05
Gd	L1	8376	1.48023	0.88
Dy	L2	8581	1.44487	4.47
Tm	L3	8648	1.43368	4.12
Tb	L1	8708	1.42380	1.33
Ho	L2	8918	1.39027	4.55
Yb	L3	8944	1.38623	4.20
Cu	K	8979	1.38082	1.78
Dy	L1	9046	1.37060	1.85
Lu	L3	9244	1.34124	4.28

Target energy: 7112

Search

Harmonic

- ☒ Fundamental
- ☐ Second
- ☐ Third

Edge finder: 在右侧输入target energy 可以查询特定能量附近的存在的吸收边，通常用于试验中确定是否存在杂志元素干扰；

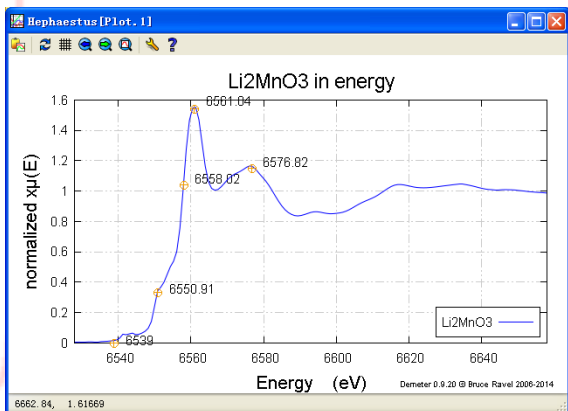
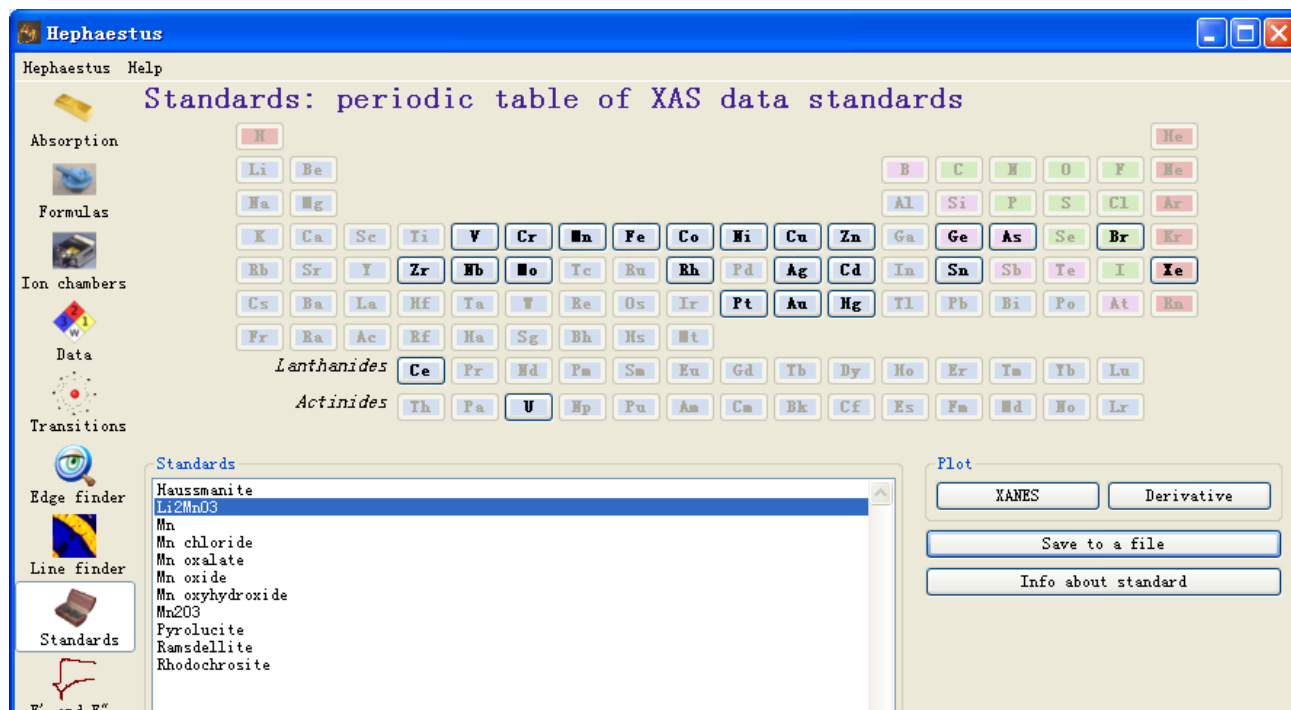
武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

HEPHAESTUS

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



新版demeter提供了部分标样的数据库;
Save to a file 可以将标样数据导出;

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

SAMPLEM4M

<http://pfwww.kek.jp/nitani/xafs2/software.html>

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



SAMPLEM for Mac

File Edit About

Clear Maximum Number of Elements 4 Calculate

Elements and Compositions

Elem.	Mole Ratio	Elem.	Mole Ratio
1 Cu	0.1	11	
2 Ce	0.1	12	
3 Ti	0.8	13	
4 O	2	14	
5		15	
6		16	
7		17	
8		18	
9		19	
10		20	

Other Conditions

Edge
☒ K ☐ L(1) ☐ L(2) ☐ L(3)

Powder Solution

Pellet Disk Diameter (mm)

Weight (mg) [optional]

Memo

Weight for powder sample
 CU*: RMU1=37.87, RMU2=288.9
 CE: RMU1=284.8731
 TI: RMU1=149.0785
 O: RMU1=8.015159
 RMU=10200.88
 RMAS=90.6826
 RMUA=130.0809
 RMUB=112.4899
 *** Completed ***

Results

Low MuT	High MuT	Delta MuT	Thickness / Weight
3.459	4.000	0.541	24.151 mg
1.991	2.303	0.311	13.902 mg
6.395	7.395	1.000	44.648 mg
3.581	4.141	0.560	25.000 mg
5.729	6.625	0.896	40.000 mg

Remark for sample

Print

深色框中为样品摩尔比；红色圈中为计算方式；蓝色圈中为计算结果（通常只看第三行）

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

SAMPLEM4M

例1 高浓度样品

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

SAMPLEM for Mac

File Edit About

Clear Maximum Number of Elements 1 Calculate

Elements and Compositions

	Elem.	Mole Ratio		Elem.	Mole Ratio
1	Cu	1	11		
2	Mo	1	12		
3	O	55.5	13		
4	H	111	14		
5			15		
6			16		
7			17		
8			18		
9			19		
10			20		

Other Conditions

Edge
☒ K ☐ L(1) ☐ L(2) ☐ L(3)

Powder Solution

Pellet Disk Diameter (mm)

Weight (mg) [optional]

Results

Low MuT	High MuT	Delta MuT	Thickness / Weight
0.524	4.000	3.476	10.874 mg
0.302	2.303	2.001	6.260 mg
0.151	1.151	1.000	3.129 mg
0.964	7.357	6.392	20.000 mg
1.929	14.714	12.785	40.000 mg

Remark for sample

Memo

Weight for powder sample
 CU*: RMU1=37.87, RMU2=288.9
 RMU=2406.487
 RMA=63.546
 RMUA=288.9
 RMUB=37.87
 *** Completed ***

Print



SAMPLEM4M

例2 低浓度样品

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

SAMPLEM for Mac

File Edit About

Clear Maximum Number of Elements 4 Calculate

Elements and Compositions

Elem.	Mole Ratio	Elem.	Mole Ratio
1 Cu	1	11	
2 o	102	12	
3 Ti	50	13	
4		14	
5		15	
6		16	
7		17	
8		18	
9		19	
10		20	

Other Conditions

Edge
☒ K ☐ L(1) ☐ L(2) ☐ L(3)

Powder Solution

Pellet Disk Diameter (mm)

Weight (mg) [optional]

Results

Low MuT	High MuT	Delta MuT	Thickness / Weight
3.836	4.000	0.164	33.079 mg
2.208	2.303	0.095	19.042 mg
23.353	24.353	1.000	201.394 mg
2.319	2.418	0.099	20.000 mg
4.638	4.837	0.199	40.000 mg

Memo

Weight for powder sample
 CU*: RMU1=37.87, RMU2=288.9
 O: RMU1=8.015159
 TI: RMU1=149.0785
 RMU=372529.5
 RMAS=4090.444
 RMUA=94.97292
 RMUB=91.07311
 *** Completed ***

Remark for sample

Print



中国科学院高能物理研究所

SAMPLEM4M

例3 高背底样品

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

SAMPLEM for Mac

File Edit About

Clear Maximum Number of Elements 4 Calculate

Elements and Compositions

Elem.	Mole Ratio	Elem.	Mole Ratio
1 Cu	10	11	
2 o	110	12	
3 ce	50	13	
4		14	
5		15	
6		16	
7		17	
8		18	
9		19	
10		20	

Other Conditions

Edge
☒ K ☐ L(1) ☐ L(2) ☐ L(3)

Powder Solution

Pellet Disk Diameter (mm)

Weight (mg) [optional]

Results

Low MuT	High MuT	Delta MuT	Thickness / Weight
3.709	4.000	0.291	13.465 mg
2.135	2.303	0.167	7.751 mg
12.749	13.749	1.000	46.283 mg
8.264	8.912	0.648	30.000 mg
11.018	11.883	0.864	40.000 mg

Remark for sample

Print

Memo
 Weight for powder sample
 CU*: RMU1=37.87, RMU2=288.9
 O: RMU1=8.015159
 CE: RMU1=284.8731
 RMU=2.033707e+06
 RMAS=9400.35
 RMUA=233.3133
 RMUB=216.3437
 *** Completed ***



SAMPLEM4M

例4 薄膜样品

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

SAMPLEM for Mac

File Edit About

Clear Maximum Number of Elements 2 Calculate

Elements and Compositions

Elem.	Mole Ratio	Elem.	Mole Ratio
1 Cu	1	11	
2 Cl	2	12	
3 O	55.5	13	
4 H	111	14	
5		15	
6		16	
7		17	
8		18	
9		19	
10		20	

Other Conditions

Edge
☒ K ☐ L(1) ☐ L(2) ☐ L(3)

Powder Solution

Density of Solution (g/cm³)
 2.54

Thickness (mm) [optional]
 1.0 2.0

Results

Low MuT	High MuT	Delta MuT	Thickness / Weight
1.343	4.000	2.657	0.088 mm
0.773	2.303	1.530	0.051 mm
0.505	1.505	1.000	0.033 mm
15.230	45.365	30.136	1.000 mm
30.459	90.730	60.271	2.000 mm

Remark for sample

Memo

Thickness for solution sample
 CU*: RMU1=37.87, RMU2=288.9
 CL: RMU1=79.75535
 RMU=8061.62
 RMA=134.452
 RMUA=178.6033
 RMUB=59.95909
 *** Completed ***

Print



中国科学院高能物理研究所

武汉·2014

主要内容

- XAFS实验方法基本要素、注意点、常见问题
- Hephaestus、SAMPLEM4M 软件功能简介
- BSRF XAFS实验站介绍（实验技术、性能指标）

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

X射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

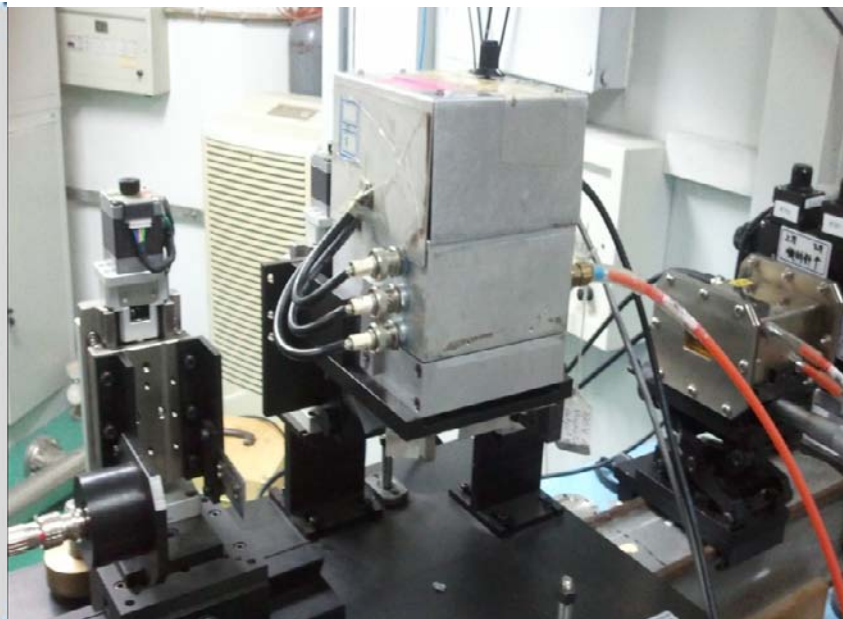
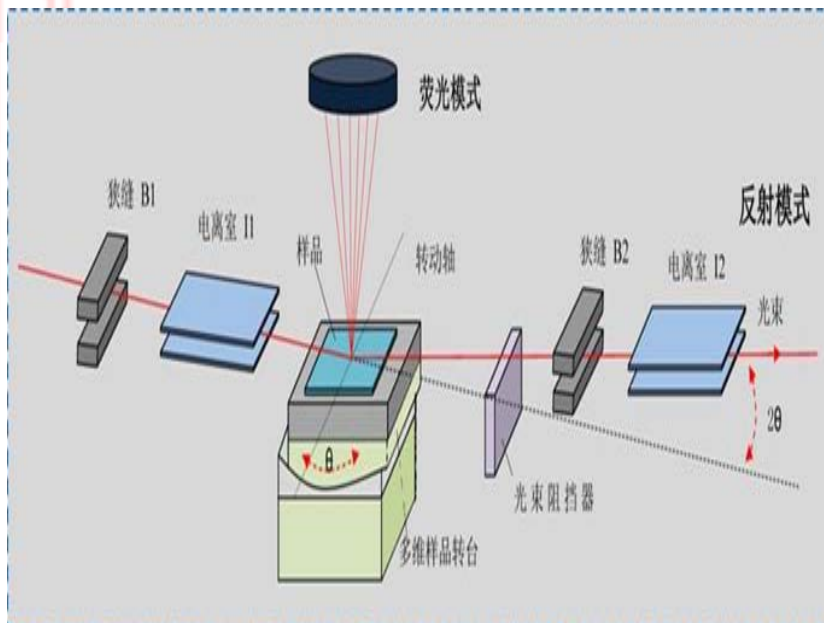
武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

实验技术：掠入射

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



- 掠入射角度调节可以通过程序自动化控制
- 发展了弱化衍射峰的多种途径
- 实验装置和弱化衍射峰的方法已分别提交实用新型和发明专利

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014

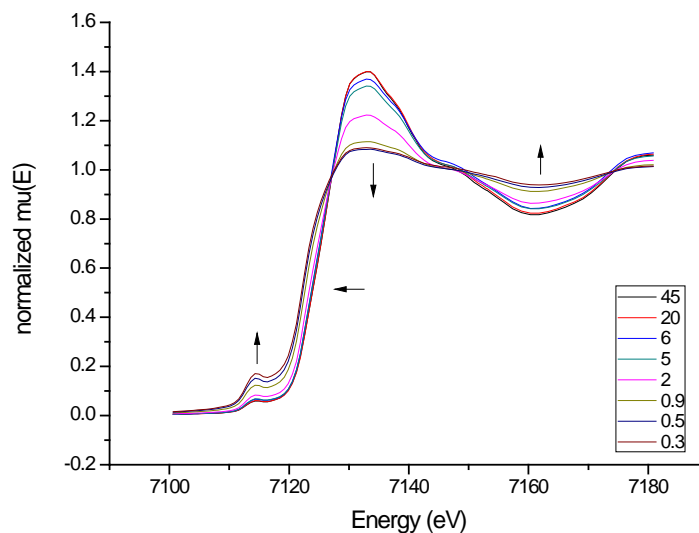
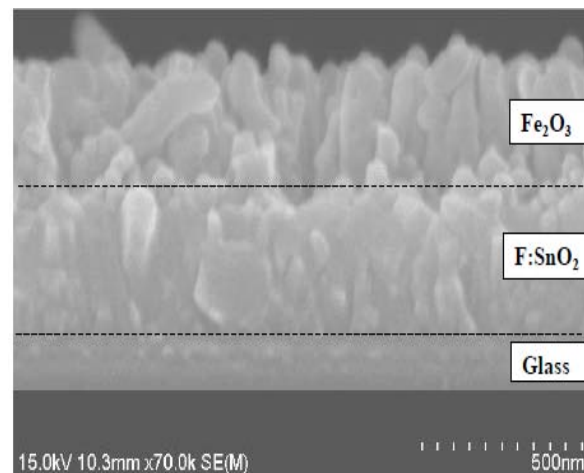


中国科学院高能物理研究所

实验技术：掠入射

➤ GI-XAS方法能提供常规XAFS所不具备的**深度剖析**，更加有利于具有层次化渐变结构材料分析。

表面经过特殊处理过的 Fe_2O_3 样品，随着掠入射角的变化，**XANES**变化明显，能够非常清楚的表征表面Fe发生**价态**变化。

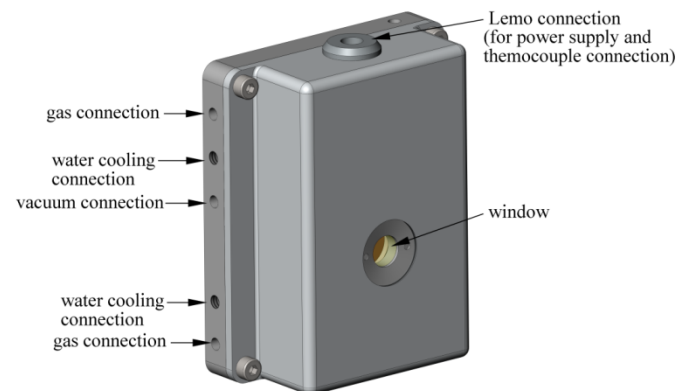
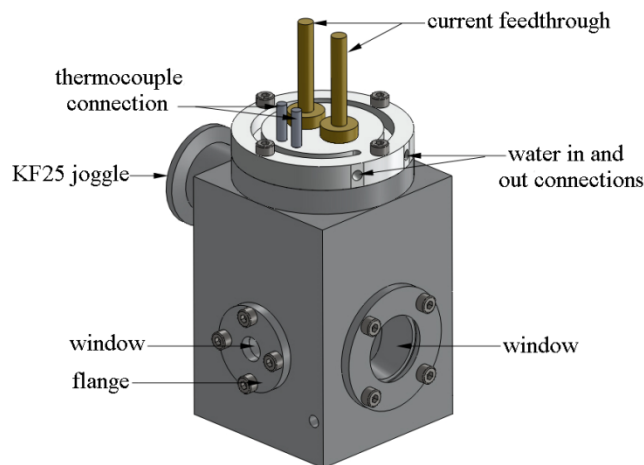


改变掠入射角度，XAFS曲线的变化；

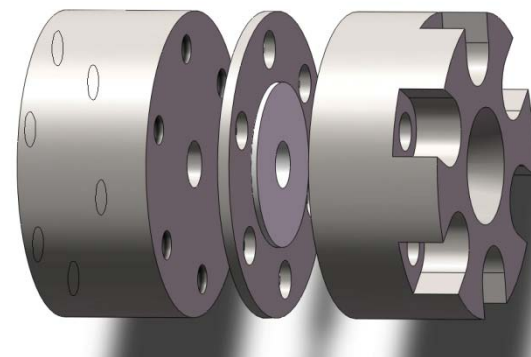


实验技术：高温原位

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



自主研发了适用于XAFS实验的多种高温原位反应器：快速升降温真空原位池，复合加热原位池，原位水热反应池等；



×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014

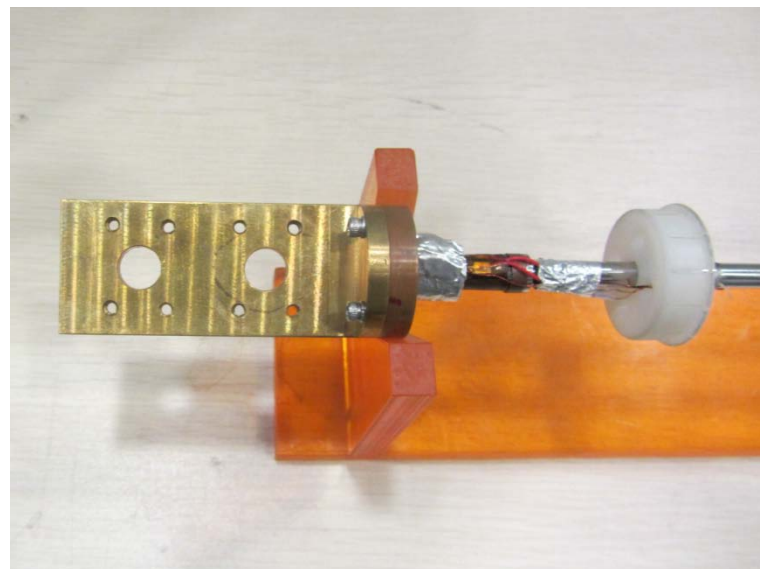


中国科学院高能物理研究所

实验技术：低温原位

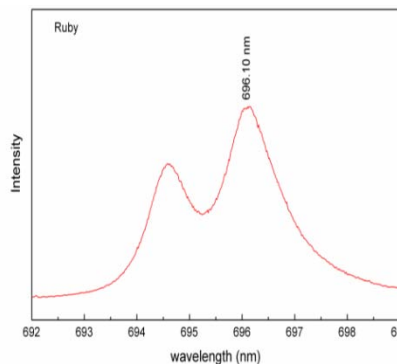
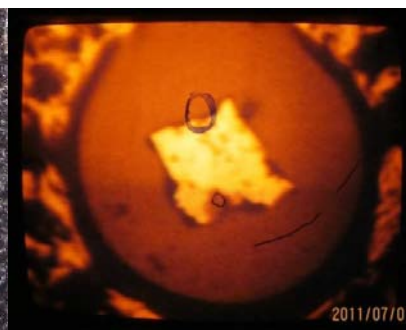
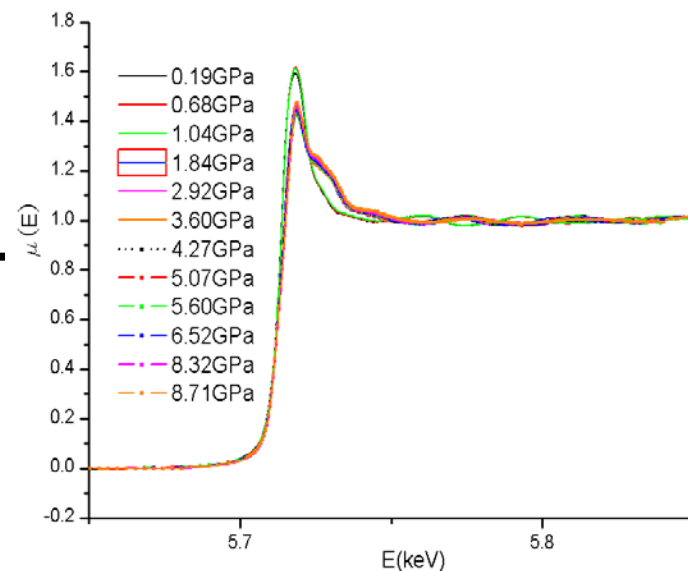
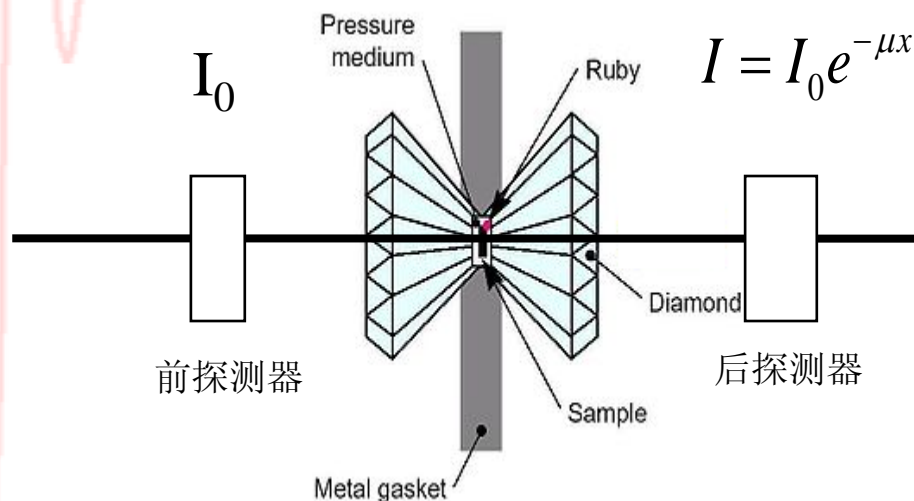
北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班



- 温度范围：10 K 至 室温
- 能同时放入2个样品
- 透射和荧光
- 低温下的数据质量好

实验技术：高压原位



预压 打孔

装样、压标、传压介质

加压

测压

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

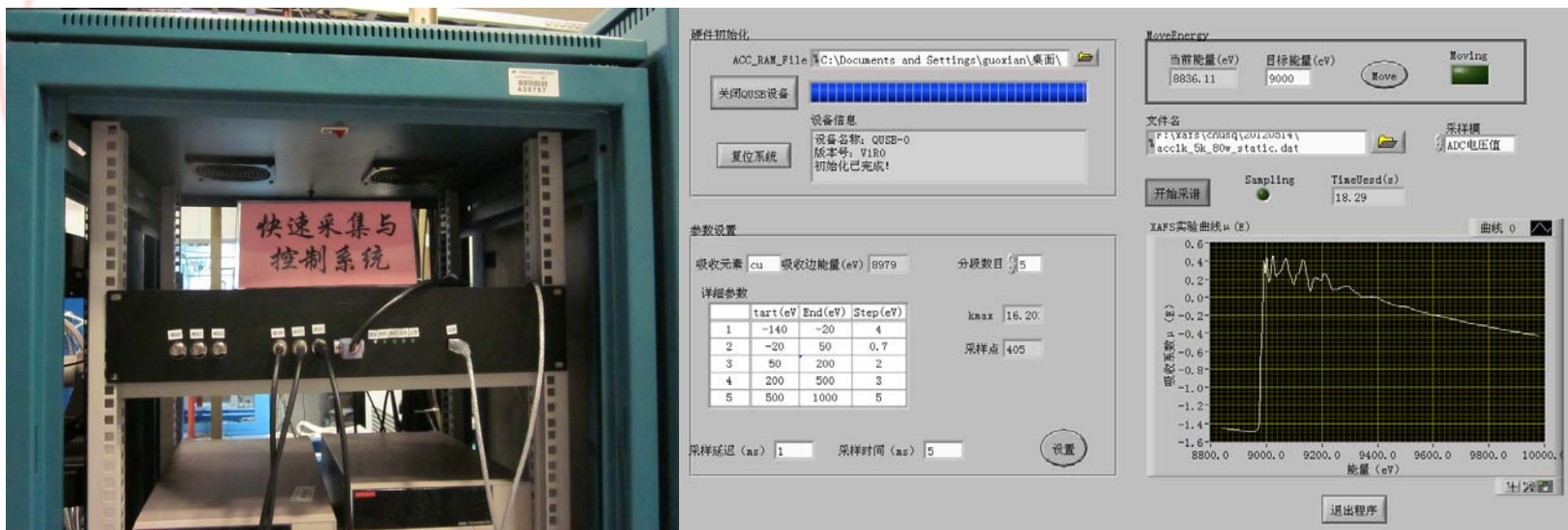
×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

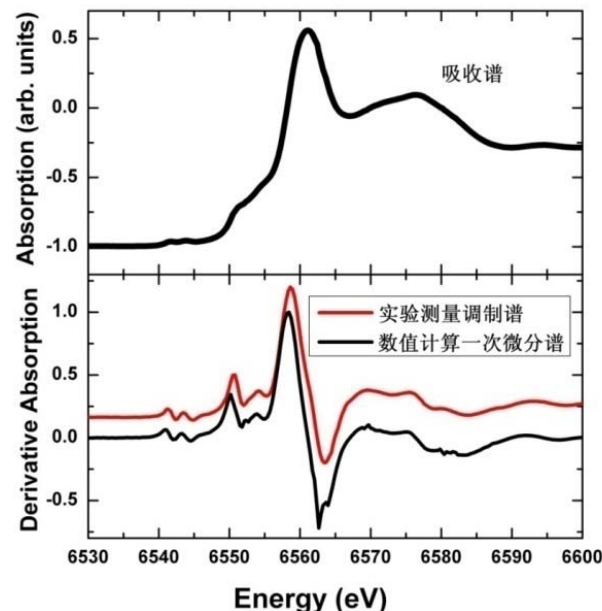
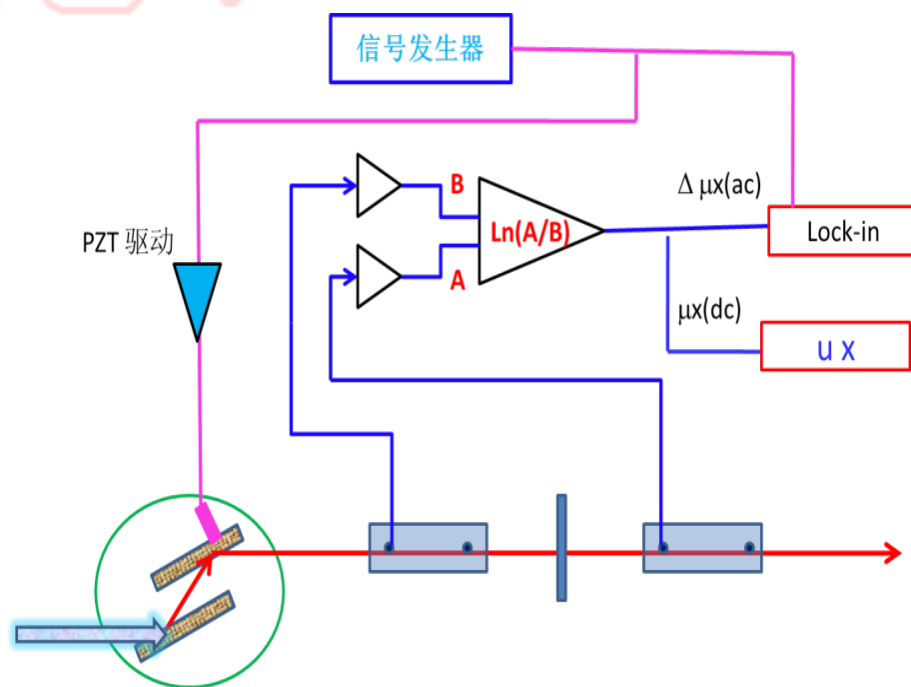
实验技术: QXAFS



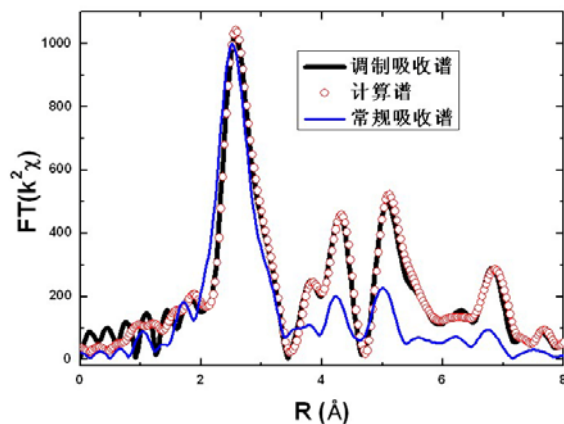
- 传统方法采用的是步进扫描式, 总耗时在15-25分钟或更长
- QXAFS单色器驱动电机以特定的速率快速连续转动, **采谱时间**缩短至分钟甚至秒量级, 提高了效率。
- QXAFS方法常用于结合原位实验条件, 例如反应时间、温度、压力等, 对**动态过程开展研究**, 例如催化、相变、成核、合成反应等

新技术发展：能量调制XAFS

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



Li₂MnO₃中Mn的k边近边调制谱与吸收谱对比



Nb标样调制谱与吸收谱R空间对比

1. 调制吸收谱能突出常规测量中不明显的微结构，提高吸收谱测量的灵敏度。
2. 相比常规吸收谱，调制谱多了一项为 $-iR$ 的系数，对高R部分即高配位层的微弱信号有放大作用，更利于对高配位层的研究。

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

实验技术小结:

可以提供的XAFS实验技术:

- 1 常规 (透射、荧光, 10ppm)
- 2 时间分辨 (动态过程, 10s)
- 3 温度 (合成、催化等原位条件, 10-1000k)
- 4 压力 (相变, 40Gpa)
- 5 掠入射 (表面结构)

正在研发的XAFS实验技术:

- 1 微区荧光 (二维分布)
- 2 调制技术 (外部条件响应)
- 3 全电子产额 (表面结构)



1W1B 实验站

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



- 能量范围：4 ~ 23 KeV
- 能量分辨率： $< 1 \sim 3 \times 10^{-4} @ 9 \text{KeV}$
- 光通量： $> 3 \times 10^{11} @ 10 \text{KeV}$
- 光斑尺寸： $0.9 \times 0.3 \text{ mm}^2$
- 每年专用光3个月；兼用光4个月

实验技术：
常规（透射、荧光10ppm）；
时间分辨；
低温（10k）；
高温（1000k）；
高压（40Gpa）；
掠入射；

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所

1W2B 实验站

北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility



- 能量范围：5 ~ 18 KeV
- 能量分辨率： $< 1 \sim 3 \times 10^{-4} @ 9\text{KeV}$
- 光通量： $> 3 \times 10^{11} @ 10\text{KeV}$
- 光斑尺寸： $0.6 \times 0.3 \text{ mm}^2$
- 每年运行3个月 专用光，4个月兼用光；

实验技术：
常规（透射、荧光100ppm）；
时间分辨；
低温（100k）；
高温（1000k）；
高压（40Gpa）；
掠入射；

×射线吸收谱学实验
和数据分折讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所



北京同步辐射装置
Beijing Synchrotron Radiation Facility

谢谢!

×射线吸收谱学实验
和数据分析讲习班

武汉·2014



中国科学院高能物理研究所