

第三节：基于Avantage的数据分析及软件使用

主要内容：

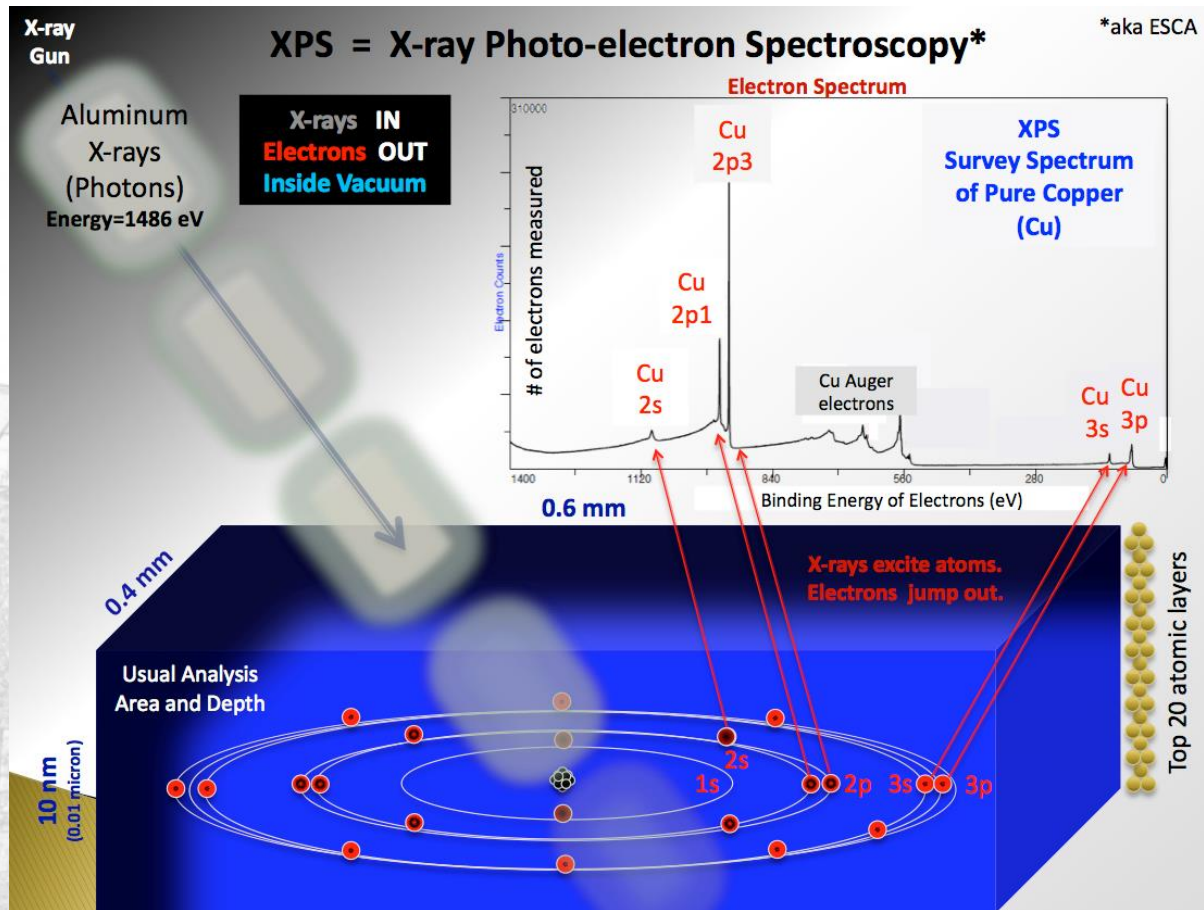
一、基本谱峰结构组成

二、数据分析——分峰拟合

三、分析应用实例

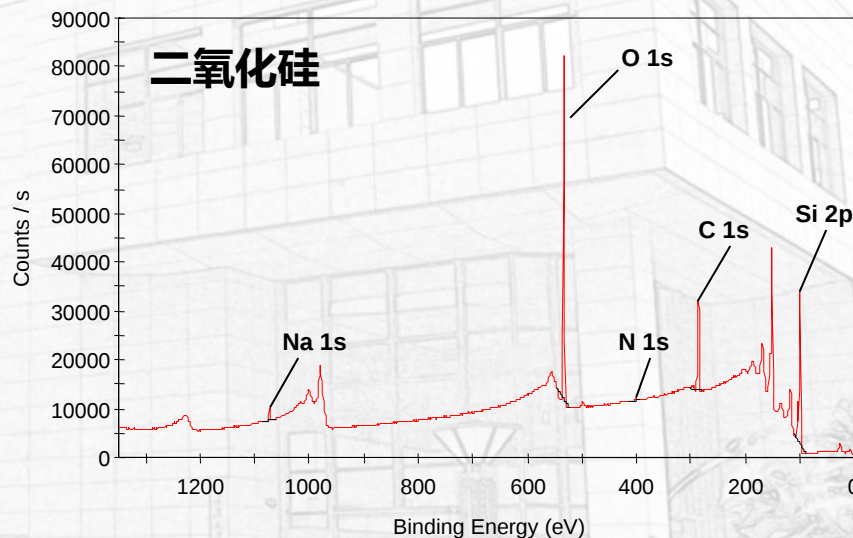
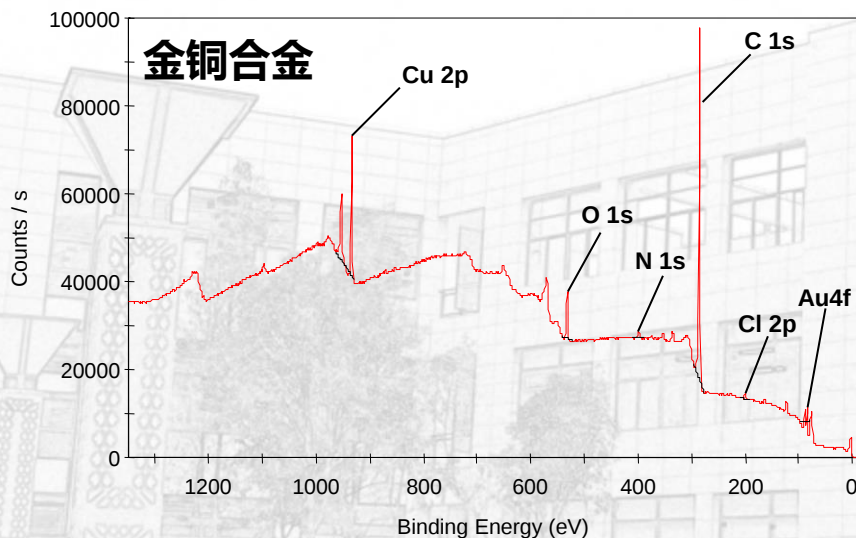
一、基本谱峰结构组成

- 在XPS图谱中常见的几种谱峰结构
 - 基于XPS理论 ($BE = h\nu - KE$) 的主峰结构
 - 依赖于物理和化学性质的伴峰结构



XPS主峰结构——光电子峰

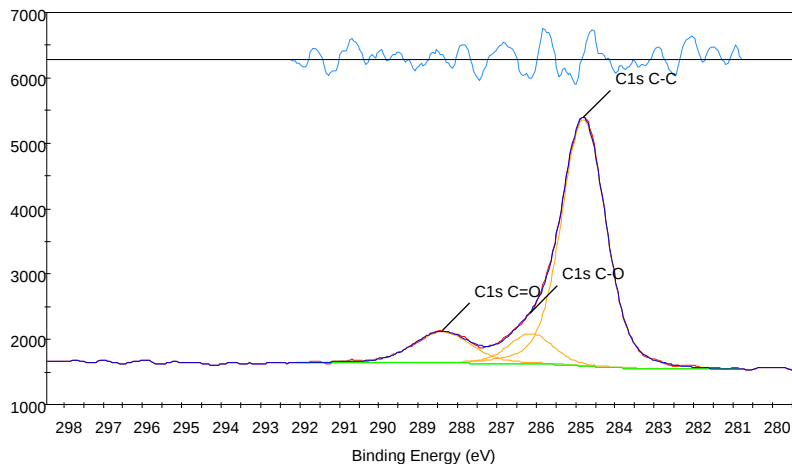
- 由于X射线激发源的能量较高，因此XPS过程可以同时激发出多个原子轨道的光电，在 XPS谱图上会出现（属于同一个元素的）多组峰结构。
- **最强的光电子峰** 一般是谱图中强度最大、峰宽小、对称性最好的谱峰，称为 XPS 的主峰。每一种元素都有本征的光电子峰，它是元素定性和半定量分析的主要依据。
- 光电子峰的标记：以被激发的元素及轨道来标记，如 C1s, Al2p, Ag3d^{5/2} 等



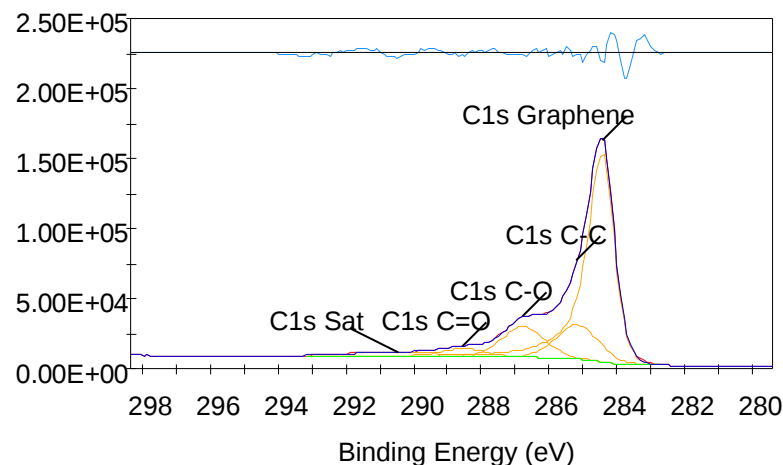
XPS主峰特征参数

- 峰位置（结合能）——表征元素及能级轨道，与化学态有关
- 峰强度——表征元素在探测表面的浓度，也与元素该轨道灵敏度因子有关
- 峰宽（FWHM）——XPS谱峰半高宽贡献主要来自于仪器参数、射线能量展宽、元素轨道本征宽度、在样品中表现的价态等几个方面；一般高分辨图谱拟合建议宽度范围0.5eV ~ 2eV 左右

C1s Scan



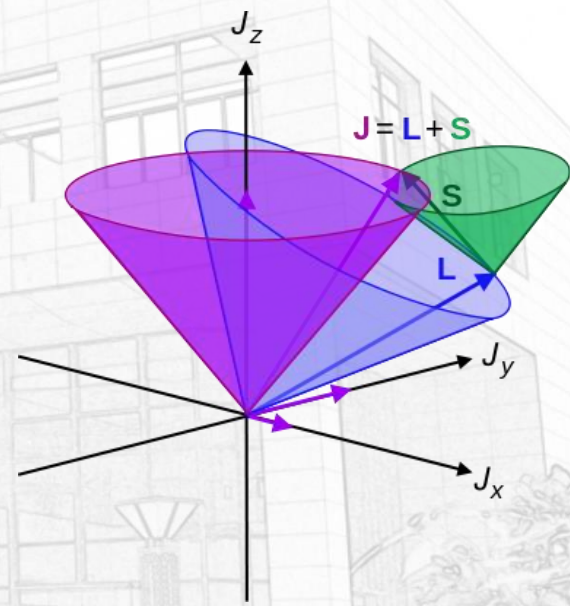
C1s Scan



自旋轨道劈裂的主峰

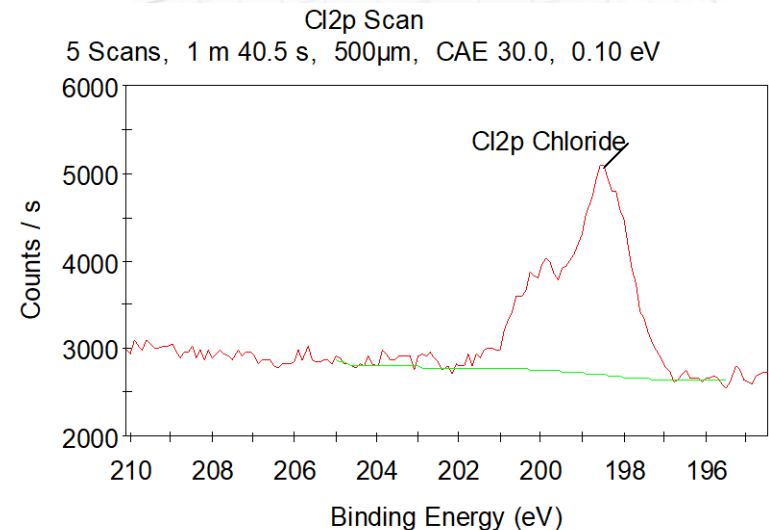
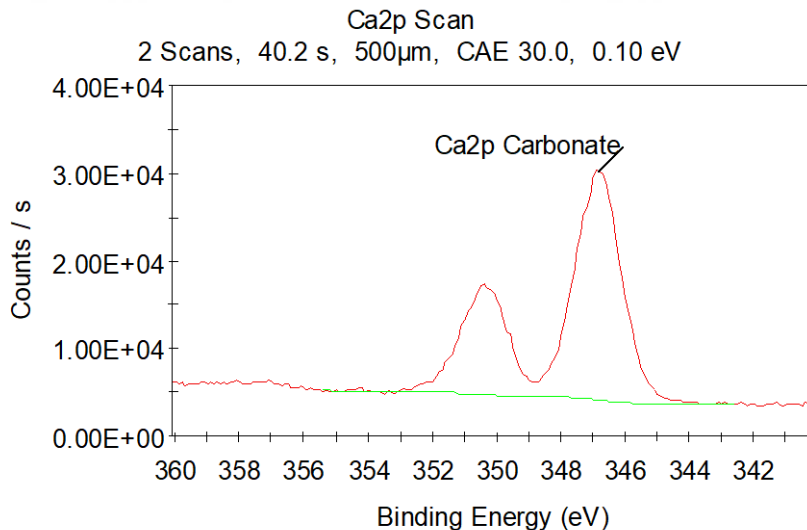
- 自旋-轨道分裂（SOS）是XPS过程中的初态效应。对于具有轨道角动量的电子，将会发生自旋 (s) 磁场与轨道角动量 (l) 的耦合。总角动量 $j = |l \pm s|$ 。对每个 j 值自旋-轨道分裂能级的简并度 $= 2j + 1$
- 元素的 s 轨道，无自旋-轨道分裂，XPS 图谱表现单峰
- $p, d, f \dots$ 轨道是自旋-轨道分裂的，XPS 图谱表现为双峰结构
- SOS 的基本规律
 - 分裂大小 D 随 Z 增加
 - D 值随化学态会有变化，如 Sc 、 Ti 、 V 、 Cr 等元素
 - 双峰强度比例有如下关系：

Subshell	j values	Area Ratio
s	$1/2$	n/a
p	$1/2 \ 3/2$	1:2
d	$3/2 \ 5/2$	2:3
f	$5/2 \ 7/2$	3:4



自旋轨道劈裂的主峰

- 自旋-轨道分裂（**SOS**）是**XPS**过程中的初态效应。对于具有轨道角动量的电子，将会发生自旋 (s) 磁场与轨道角动量 (l) 的耦合。总角动量 $j = |l \pm s|$ 。对每个 j 值自旋-轨道分裂能级的简并度 $= 2j + 1$
- 元素的 **s** 轨道，无自旋-轨道分裂，**XPS** 图谱表现单峰
- **p, d, f...** 轨道是自旋-轨道分裂的，**XPS** 图谱表现为双峰结构

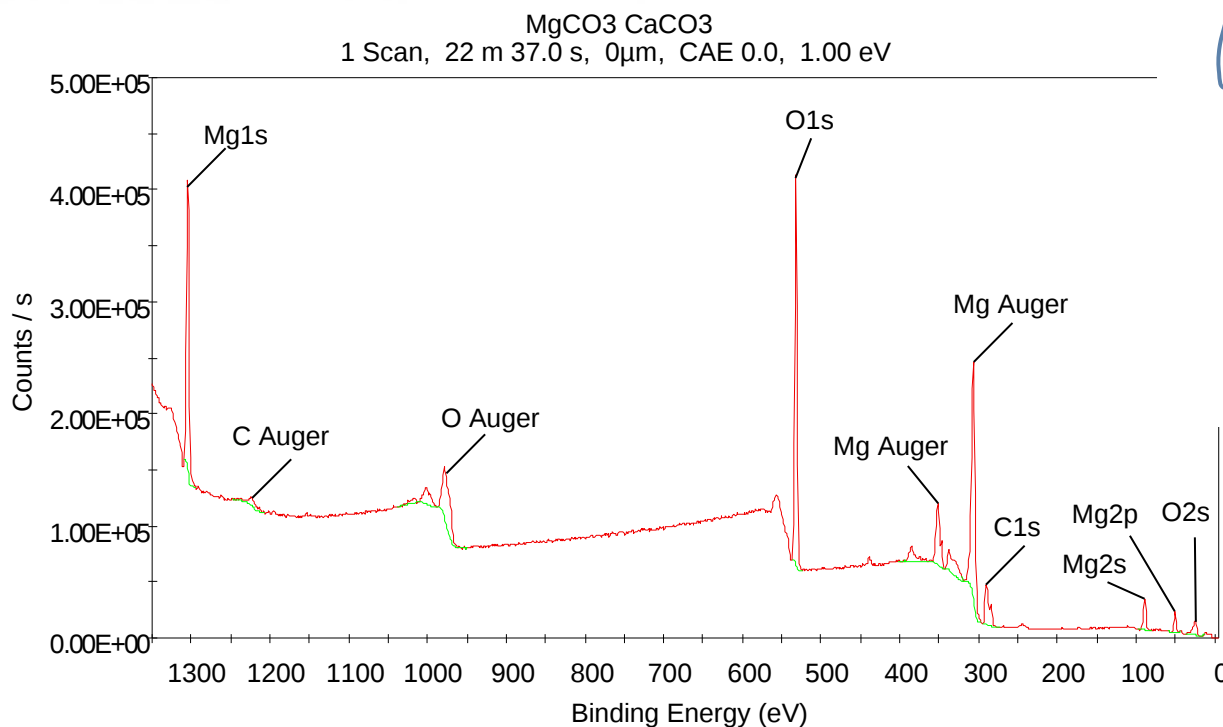
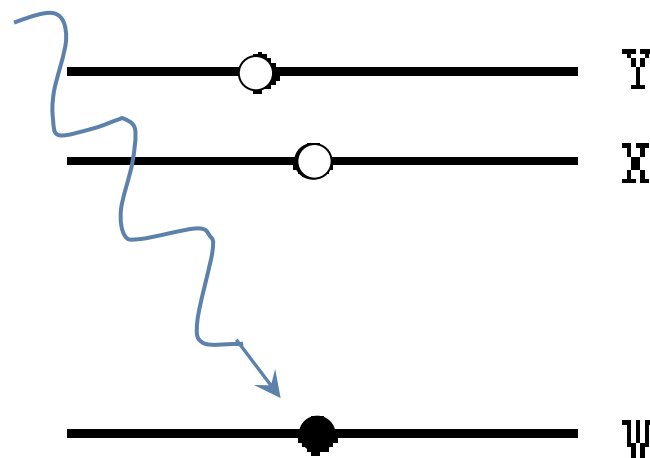


XPS的伴随效应 俄歇过程

俄歇电子

俄歇电子发射过程：入射电子束或X射线使原子内层能级电子电离，外层电子产生无辐射俄歇跃迁，发射俄歇电子，用电子能谱仪在真空中对它们进行探测。

X-rays/
electron beam



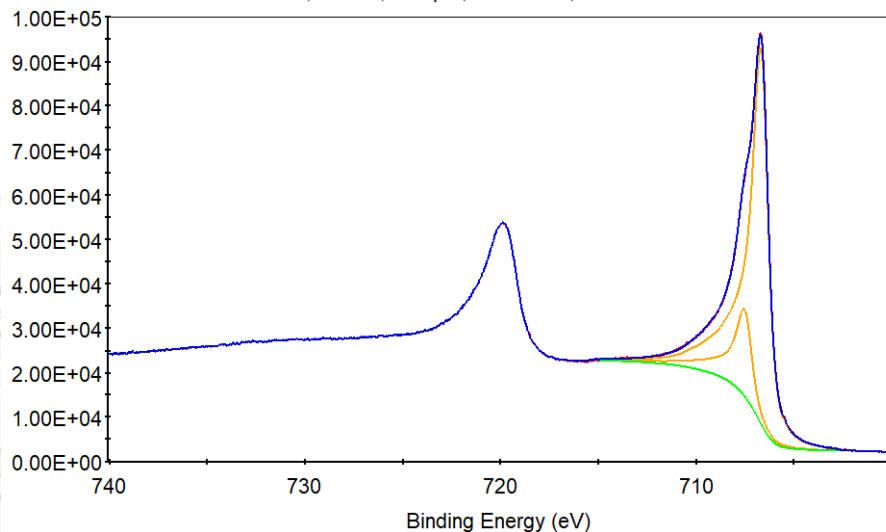
俄歇电子峰多以谱线群的形式出现。

总是伴随着 XPS，结构比XPS峰更宽和更为复杂，其动能与入射光子的能量无关

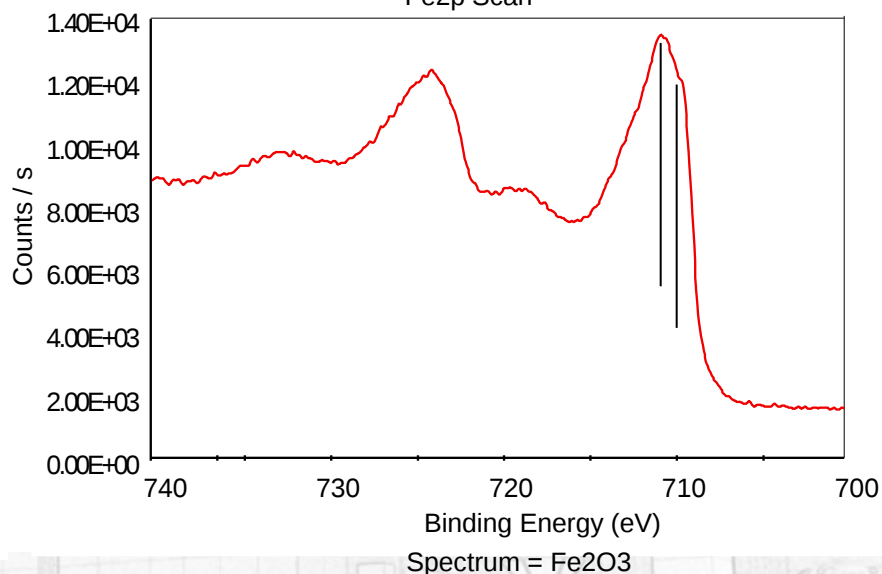
XPS的伴峰结构——终态效应

- 由结合能定义 $E_B = E_{\text{final}(n-1)} - E_{\text{initial}(n)}$ ，可以看出由于终态的不同，电子结合能分布也会表现出不同的行为。
- 过渡金属（3d轨道上有未成对电子存在造成的）多种分裂末态，如 Mn、Fe等

Fe2p Scan
1 Scan, 20.0 s, 400μm, CAE 20.0, 0.05 eV

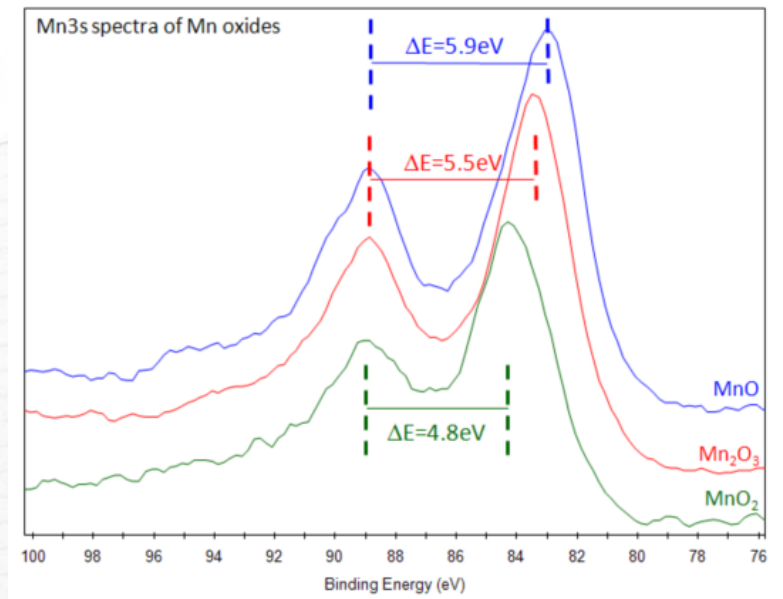
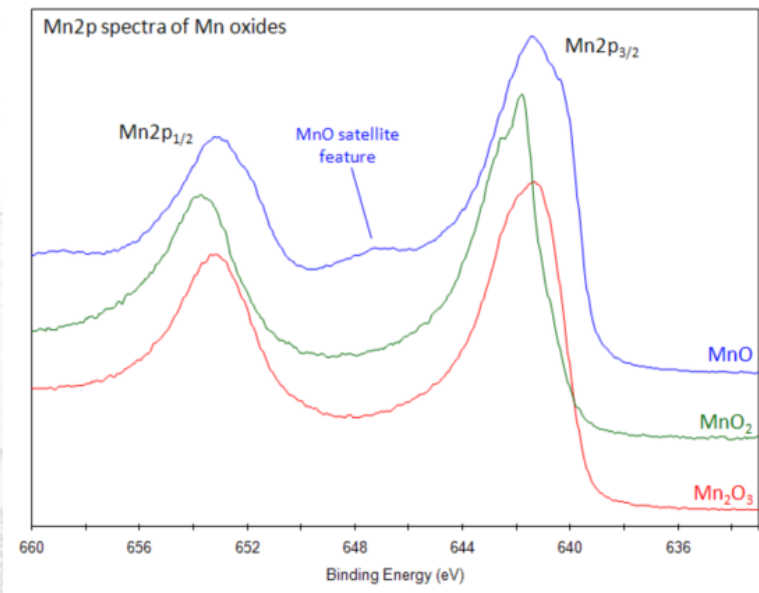


Fe2p Scan



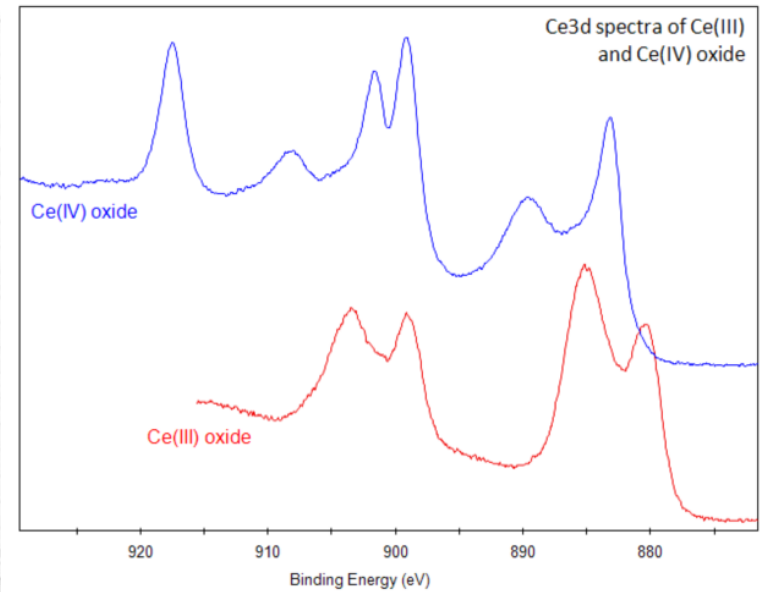
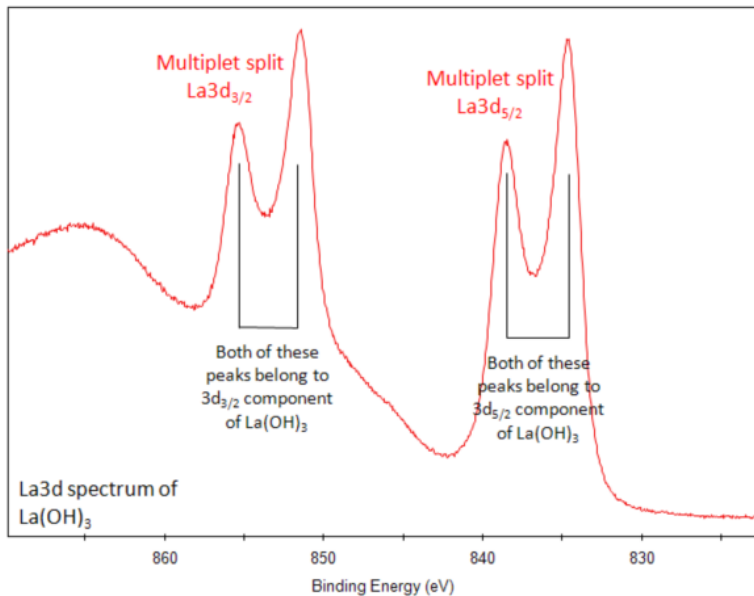
XPS的伴峰结构——终态效应

- 由结合能定义 $E_B = E_{\text{final}(n-1)} - E_{\text{initial}(n)}$ ，可以看出由于终态的不同，电子结合能分布也会表现出不同的行为。
- 过渡金属（3d轨道上有未成对电子存在造成的）多种分裂末态，如 Mn、Fe等



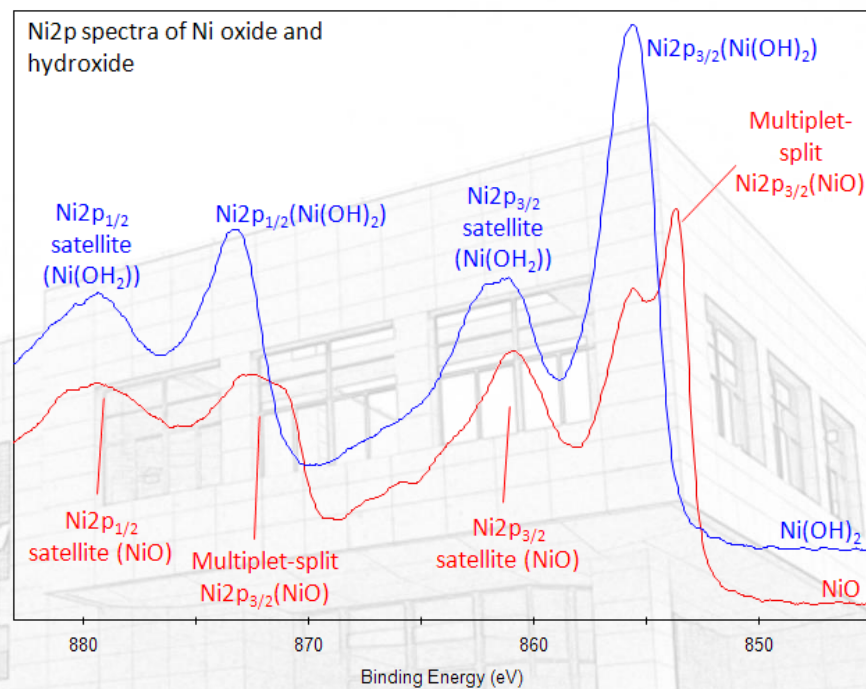
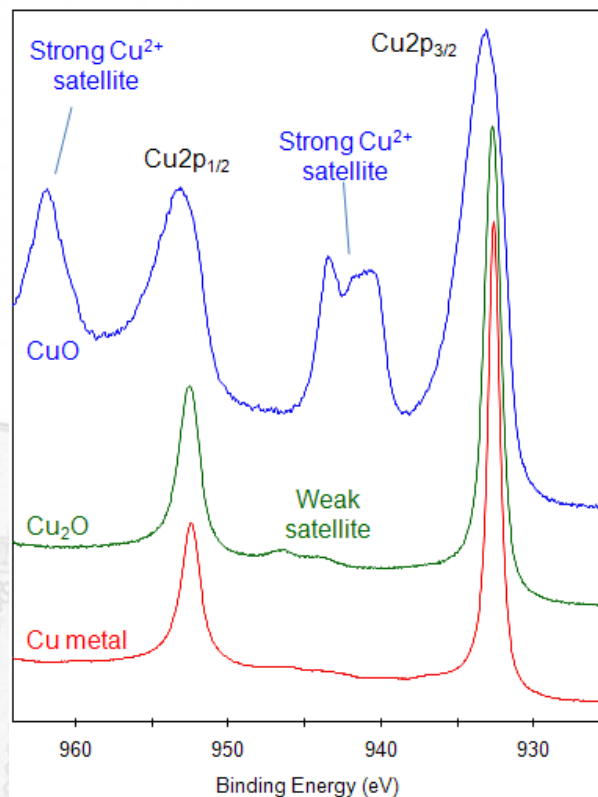
XPS的伴峰结构——终态效应

- 由结合能定义 $E_B = E_{\text{final}(n-1)} - E_{\text{initial}(n)}$ ，可以看出由于终态的不同，电子结合能分布也会表现出不同的行为。
- 过渡金属（3d轨道上有未成对电子存在造成的）多种分裂末态，如 Mn、Fe等；稀土金属4f轨道上有未成对电子也会造成
- 其他原因引起的终态效应，如与配位体结合的末态分布，如La、Ce等元素



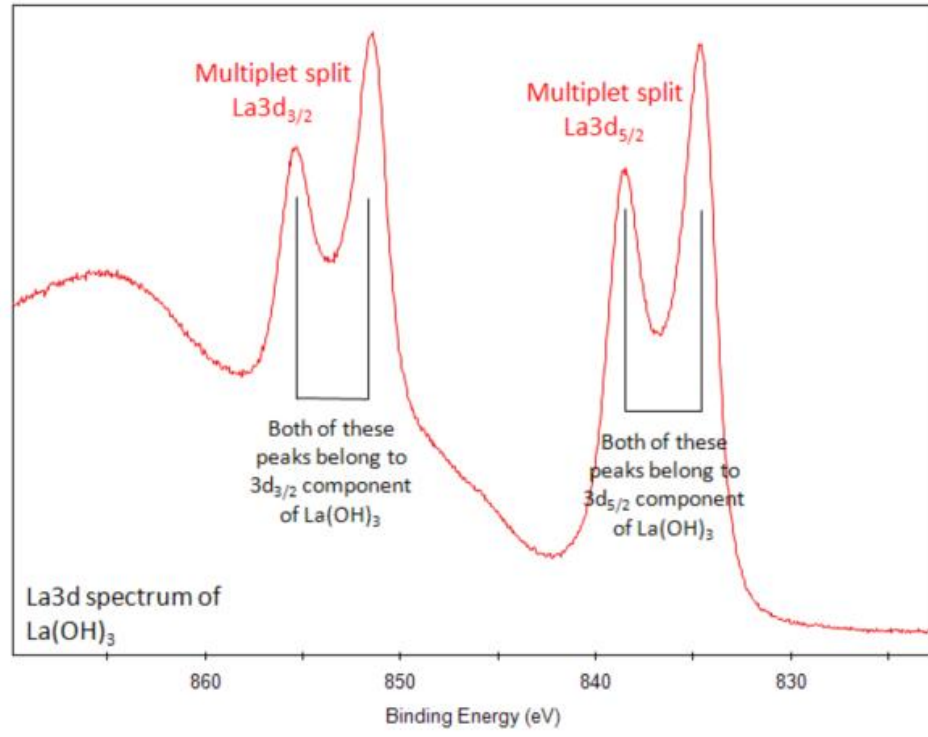
其他伴峰结构

- 震激 (shake up)、等离子体等造成的能量损失峰



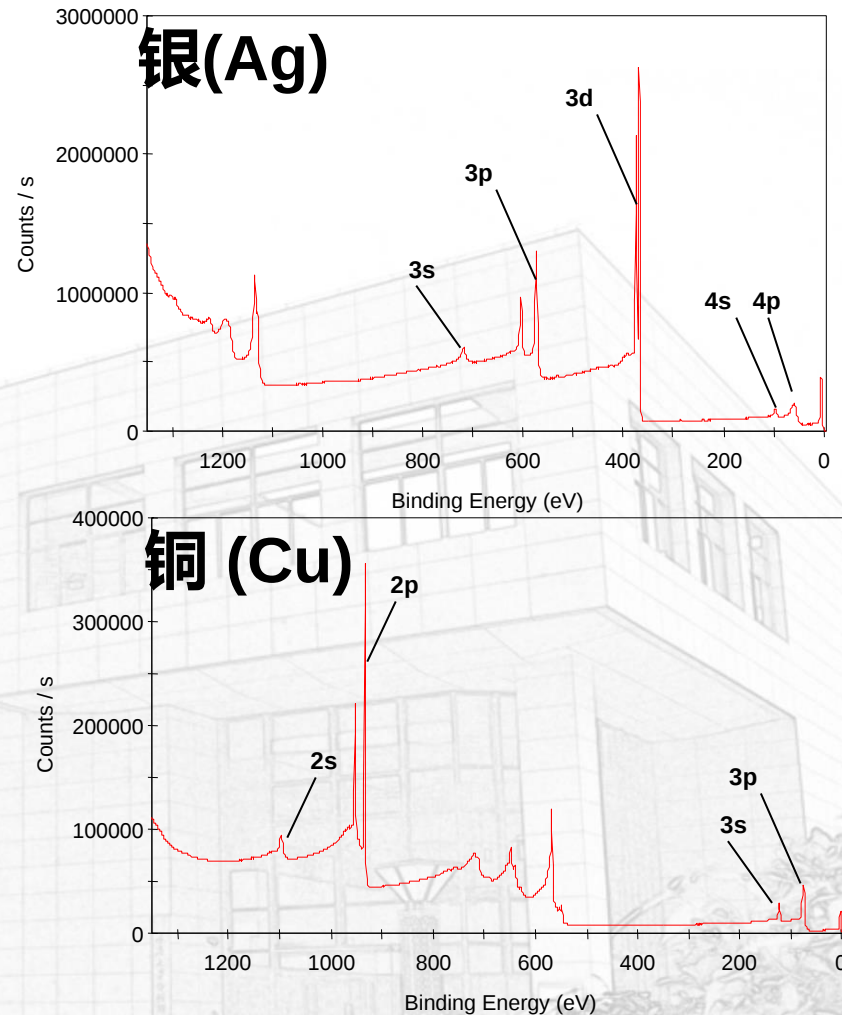
XPS图谱的背底

- XPS图谱的背底一般都显现阶梯状的背底分布，这一点在XPS全谱结构中更明显的表现。



光电发射峰

高结合能端本底总是高于低结合能端



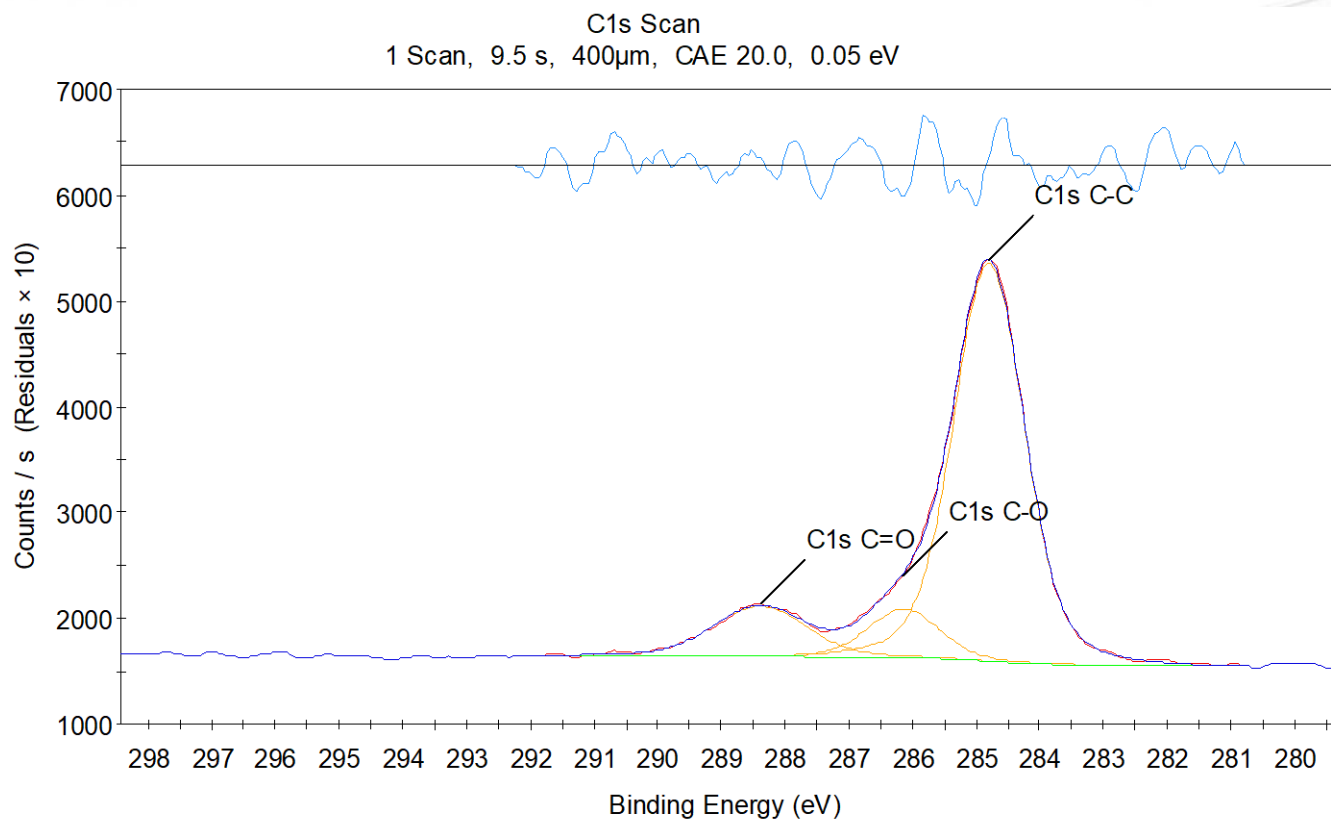
二、数据分析—分峰拟合

1. 单峰拟合
2. 双峰拟合
3. 非线性最小二乘 (NLLSF) 拟合

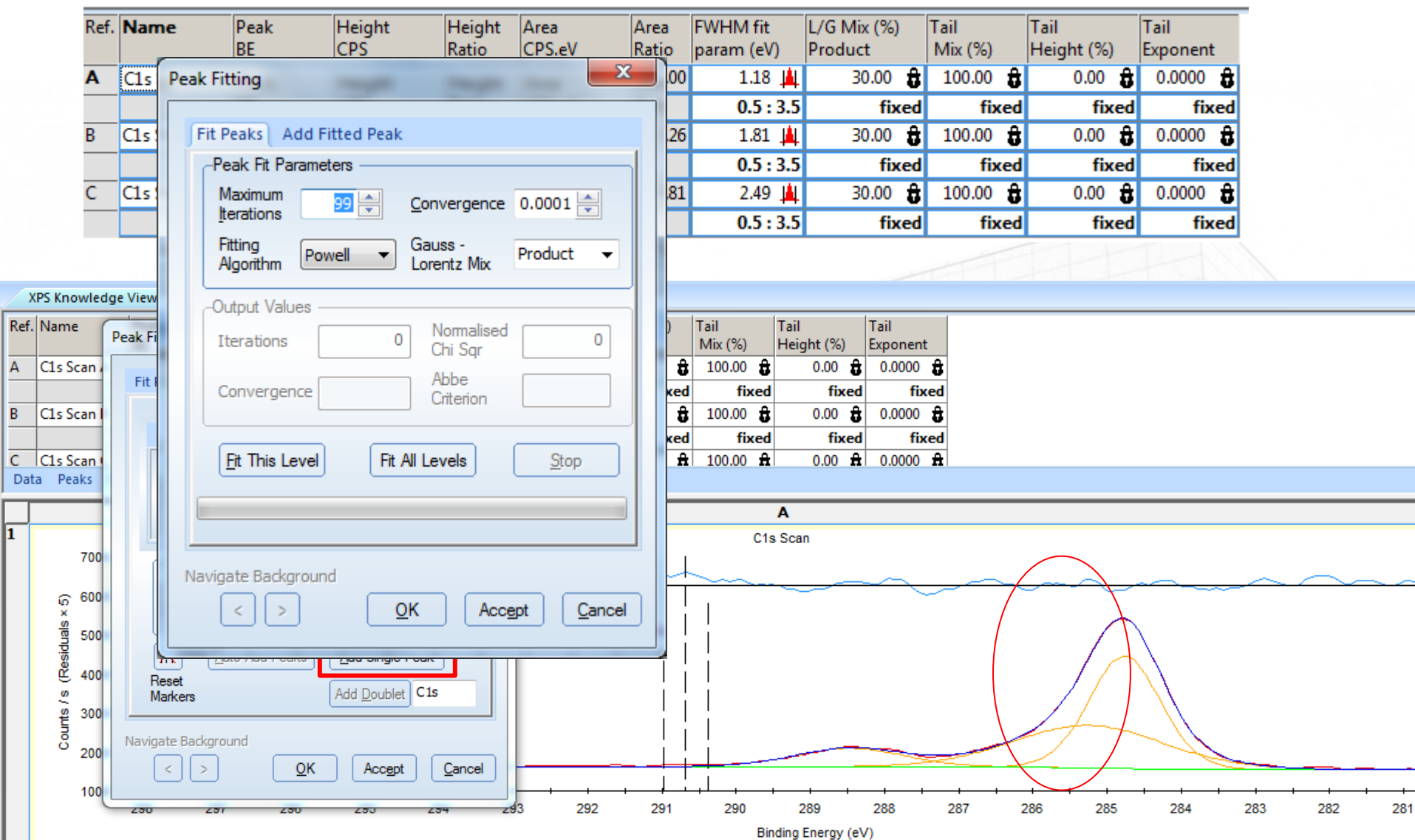


谱峰拟合——单峰拟合

Ref.	Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)	L/G Mix (%) Product	Tail Mix (%)	Tail Height (%)	Tail Exponent
A	C1s Scan A	284.81	3737.57	1.00	5574.45	1.00	1.43	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 3.5	fixed	fixed	fixed	fixed
B	C1s Scan B	288.44	554.61	0.15	827.18	0.15	1.43	30.00	100.00	0.00	0.0000
							A*1	fixed	fixed	fixed	fixed
C	C1s Scan C	286.41	496.02	0.13	739.80	0.13	1.43	30.00	100.00	0.00	0.0000
							A*1	fixed	fixed	fixed	fixed

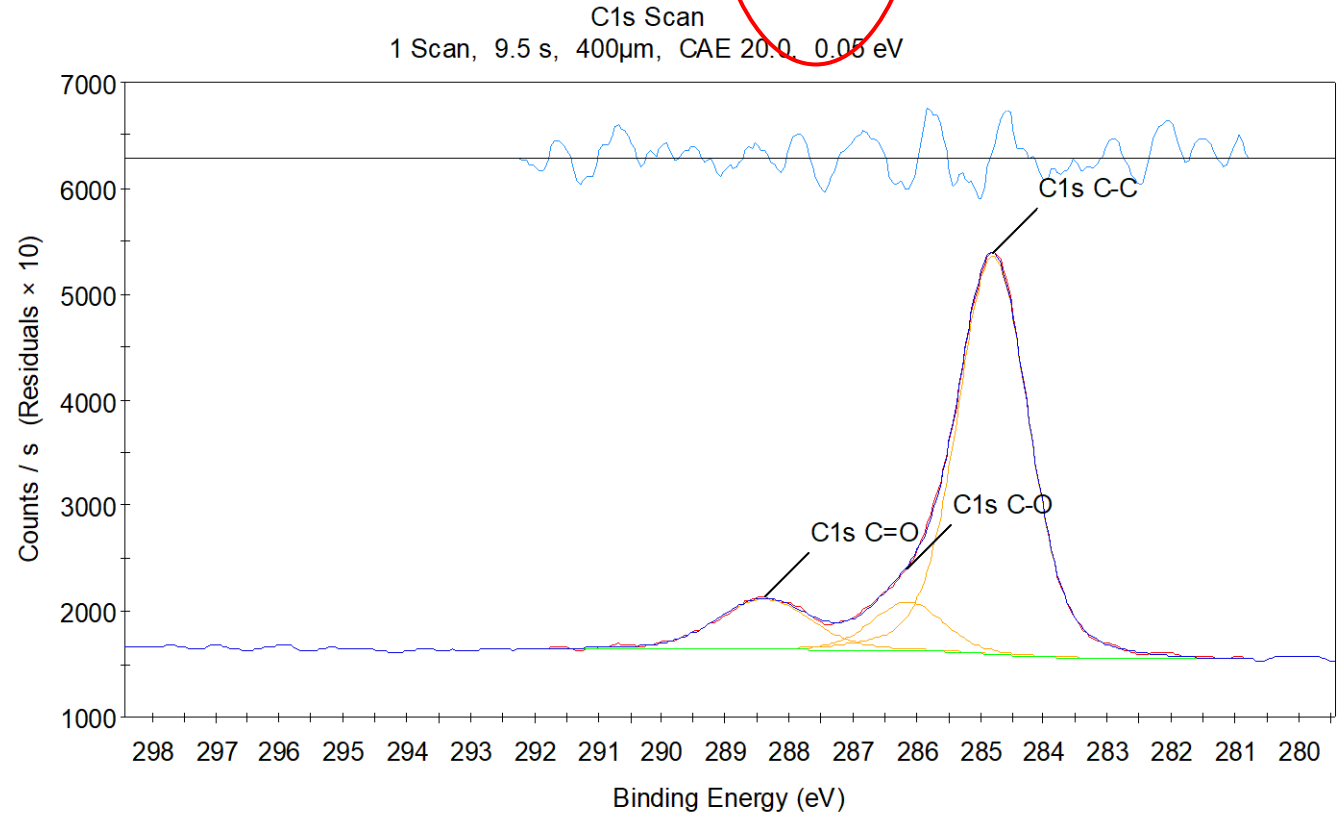


- 单峰拟合，要求有合理的峰宽和对应合理化学意义的结合能位置



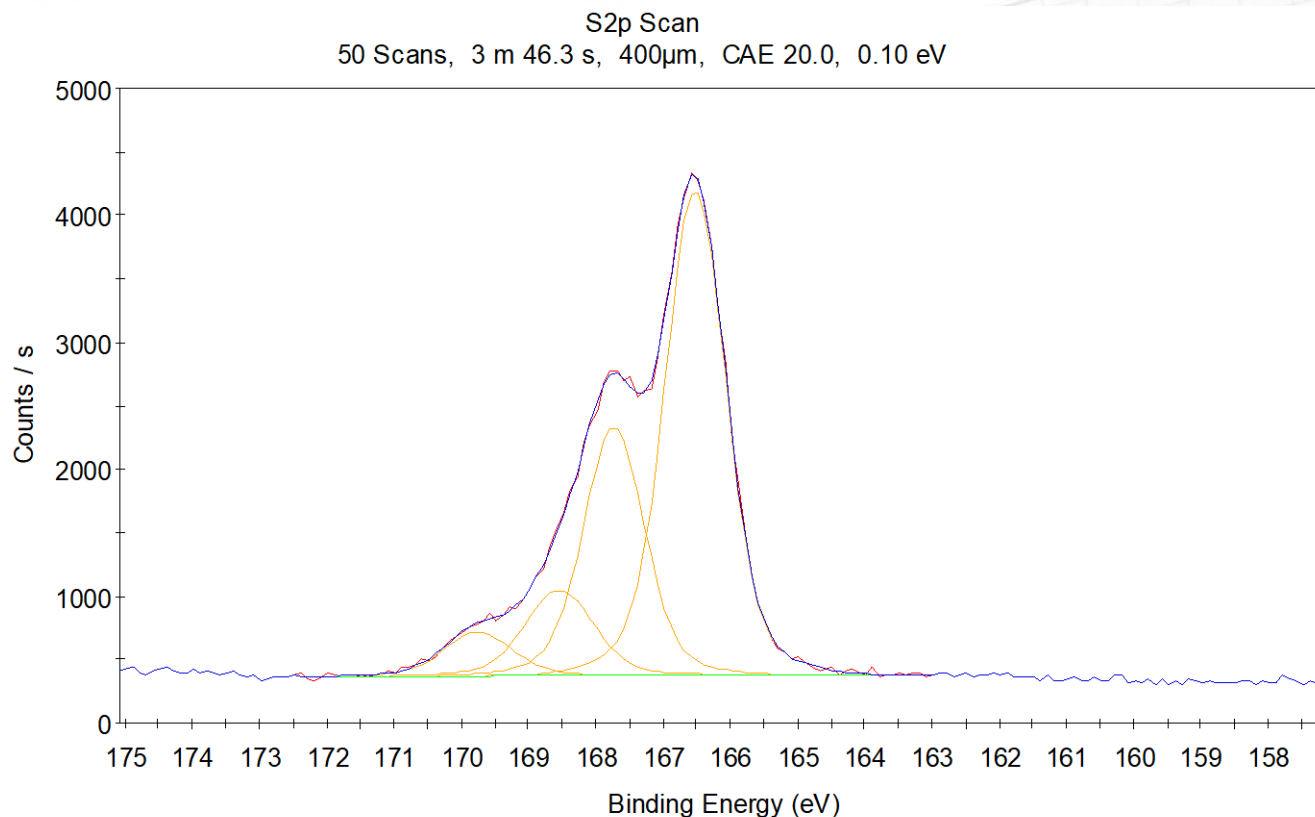
谱峰拟合——单峰拟合

Ref.	Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)	L/G Mix (%) Product	Tail Mix (%)	Tail Height (%)	Tail Exponent
A	C1s Scan A	284.81	3737.57	1.00	5574.45	1.00	1.43	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 3.5	fixed	fixed	fixed	fixed
B	C1s Scan B	288.44	554.61	0.15	827.18	0.15	1.43	30.00	100.00	0.00	0.0000
							A*1	fixed	fixed	fixed	fixed
C	C1s Scan C	286.41	496.02	0.13	739.80	0.13	1.43	30.00	100.00	0.00	0.0000
							A*1	fixed	fixed	fixed	fixed

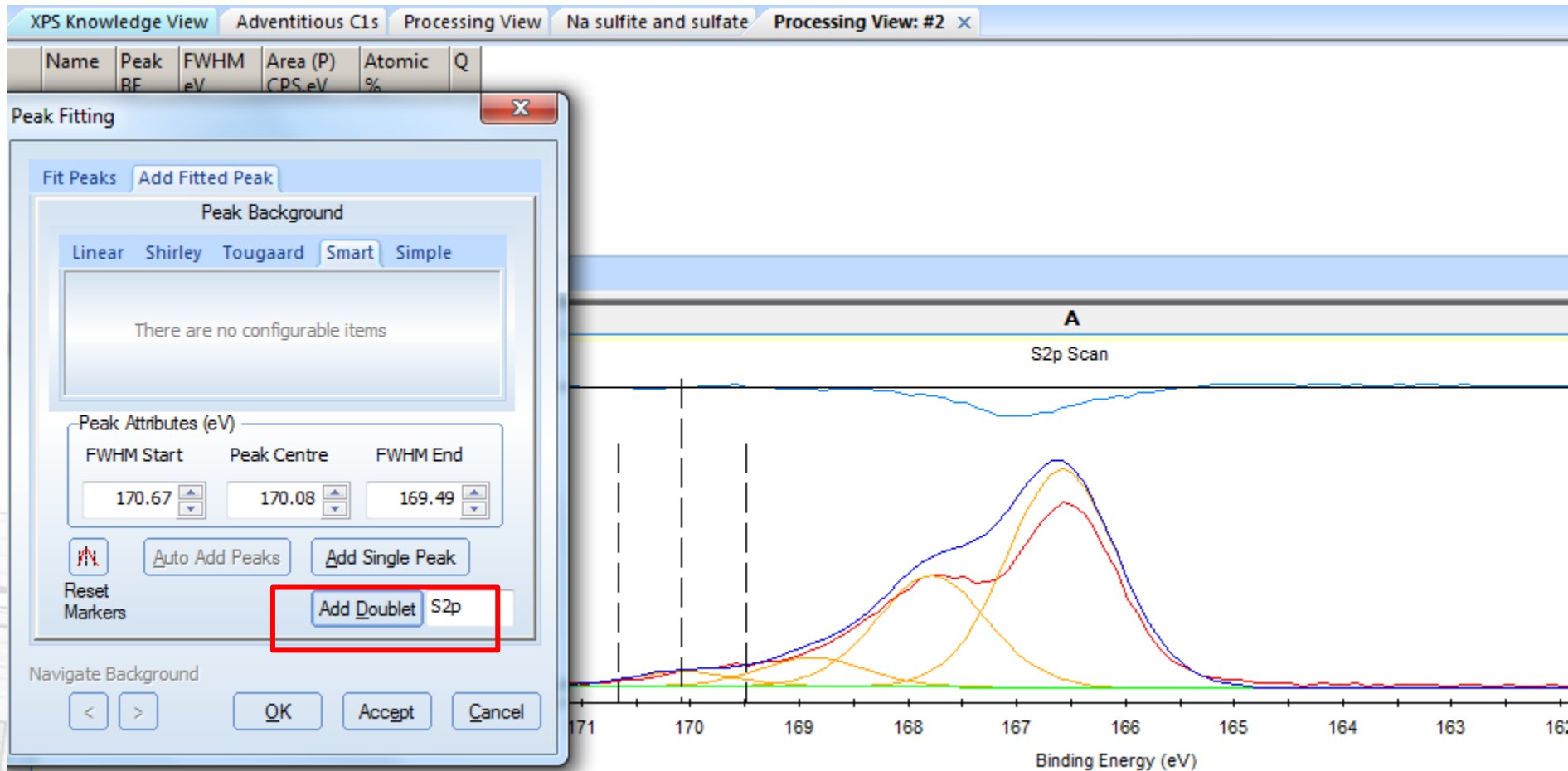


谱峰拟合——双峰拟合

Ref.	Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)	L/G Mix (%) Product	Tail Mix (%)	Tail Height (%)	Tail Exponent
A	S2p3 Scan A	166.51	3802.27	1.00	4669.02	1.00	1.18	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 3.5	fixed	fixed	fixed	fixed
B	S2p1 Scan A	167.77	1942.24	0.51	2384.98	0.51	1.18	30.00	100.00	0.00	0.0000
		A+1.20 (±0.1)	A*0.511				A*1	A*1	A*1	A*1	A*1
C	S2p3 Scan B	168.59	596.53	0.16	922.42	0.20	1.48	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 3.5	fixed	fixed	fixed	fixed
D	S2p1 Scan B	169.80	304.71	0.08	471.18	0.10	1.48	30.00	100.00	0.00	0.0000
		C+1.20 (±0.1)	C*0.511				C*1	C*1	C*1	C*1	C*1



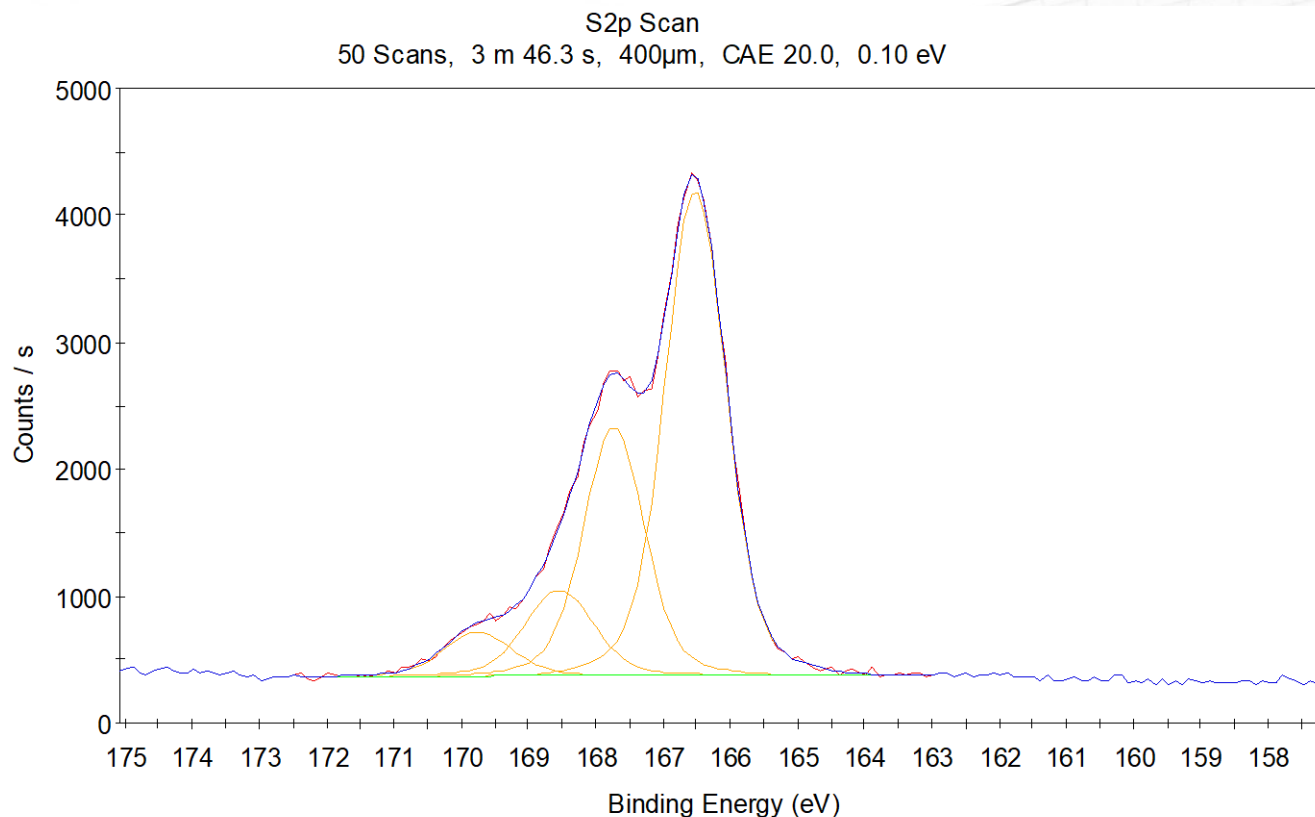
谱峰拟合——双峰拟合



- 而双峰拟合对于拟合p轨道和f轨道等双峰结构的XPS峰时更有物理和化学意义，因为此时2p_{3/2}和2p_{1/2}有着固定的峰面积比以及峰位间距

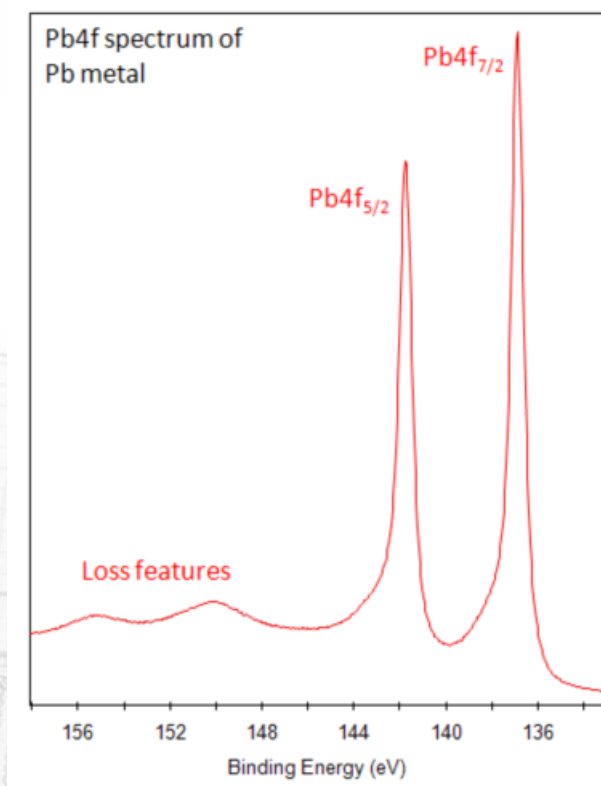
谱峰拟合——双峰拟合

Ref.	Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)	L/G Mix (%) Product	Tail Mix (%)	Tail Height (%)	Tail Exponent
A	S2p3 Scan A	166.51	3802.27	1.00	4669.02	1.00	1.18	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 3.5	fixed	fixed	fixed	fixed
B	S2p1 Scan A	167.77	1942.24	0.51	2384.98	0.51	1.18	30.00	100.00	0.00	0.0000
		A+1.20 (±0.1)	A*0.511				A*1	A*1	A*1	A*1	A*1
C	S2p3 Scan B	168.59	596.53	0.16	922.42	0.20	1.48	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 3.5	fixed	fixed	fixed	fixed
D	S2p1 Scan B	169.80	304.71	0.08	471.18	0.10	1.48	30.00	100.00	0.00	0.0000
		C+1.20 (±0.1)	C*0.511				C*1	C*1	C*1	C*1	C*1



谱峰的不对称拖尾——多电子激发

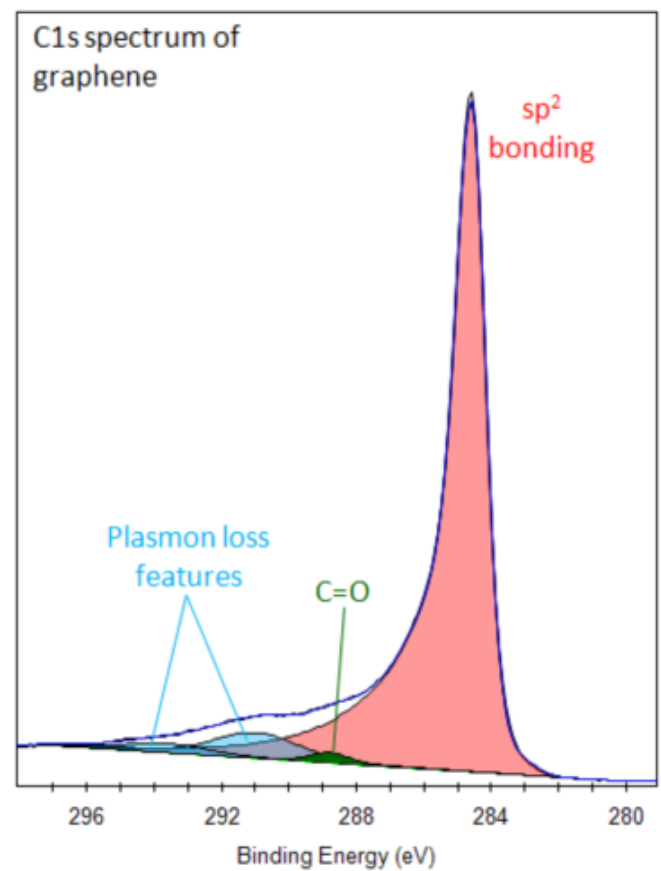
连续导带的震激——在固体金属中，费米能级以上还有未占满的能级存在（导带），也可以产生震激效应。由于不是分立的能级，因此震激效应表现为在高结合能端的不对称拖尾。



谱峰的不对称拖尾——多电子激发

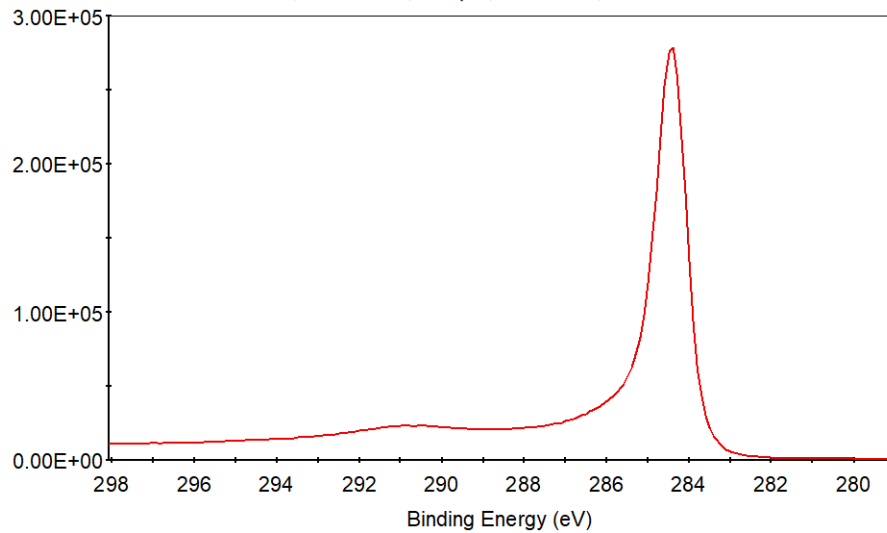
连续导带的震激——在固体金属中，费米能级以上还有未占满的能级存在（导带），也可以产生震激效应。由于不是分立的能级，因此震激效应表现为在高结合能端的不对称拖尾。

同样，一些表现金属性的材料，出现导致一些元素的谱峰出现类似的不对称拖尾行为。如，石墨烯

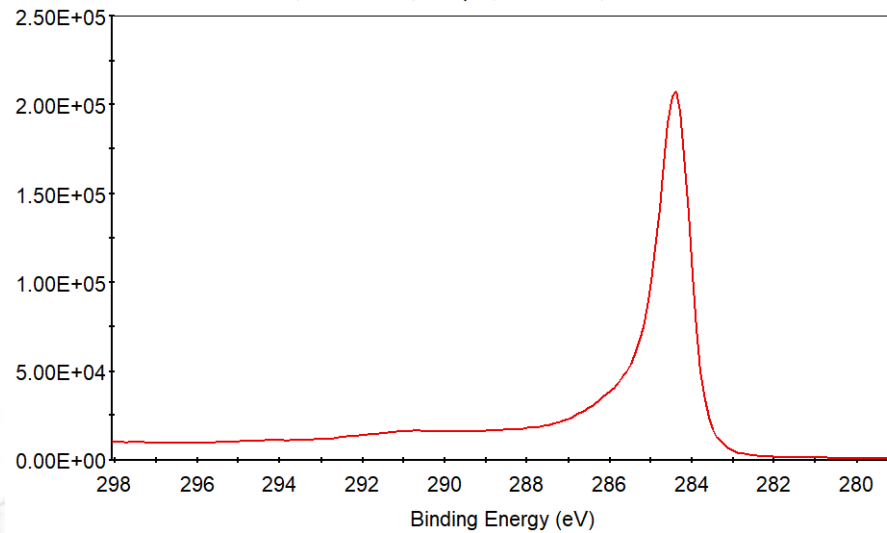


碳纳米管接枝改性系列样品

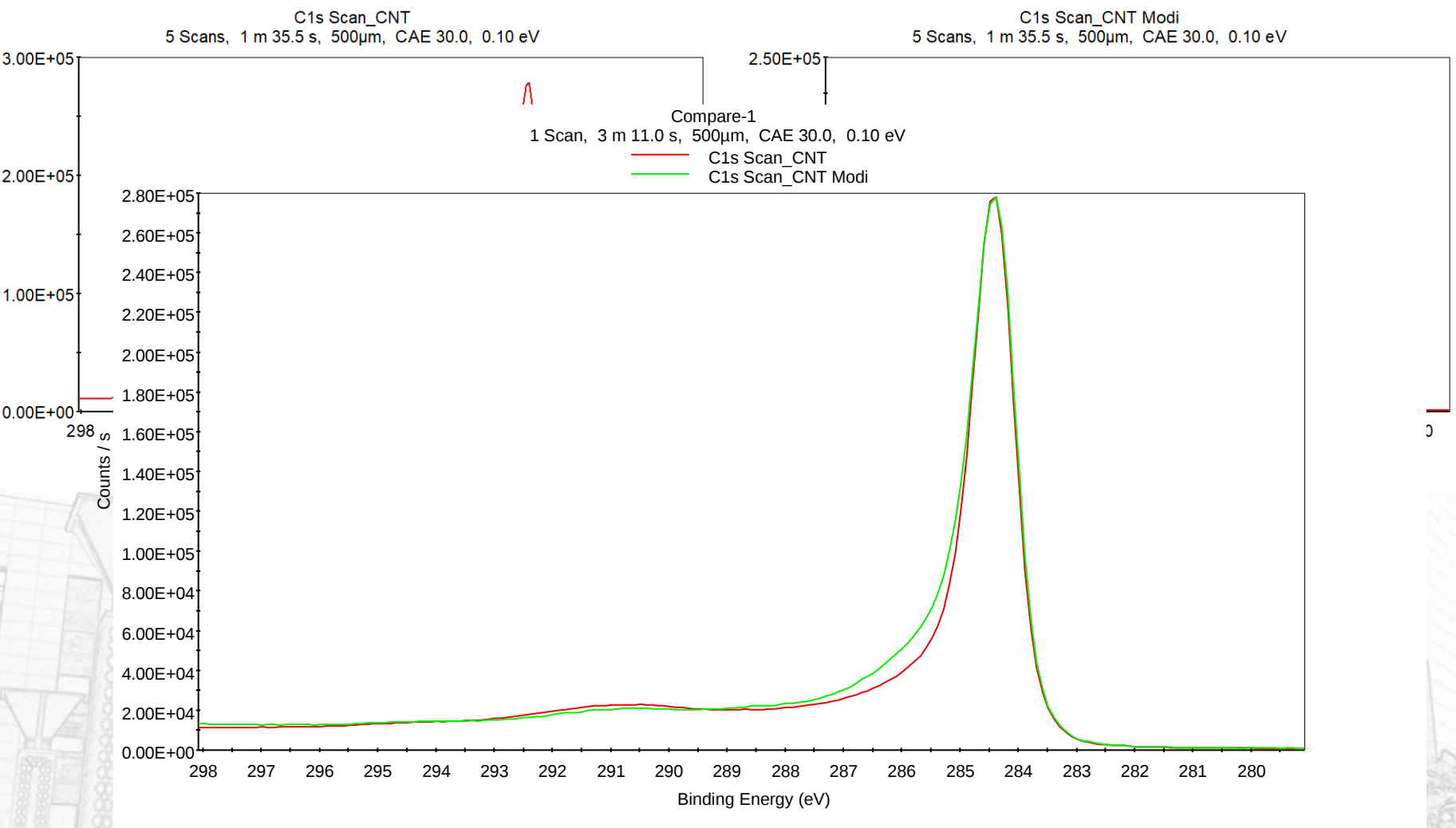
C1s Scan_CNT
5 Scans, 1 m 35.5 s, 500 μ m, CAE 30.0, 0.10 eV



C1s Scan_CNT Modi
5 Scans, 1 m 35.5 s, 500 μ m, CAE 30.0, 0.10 eV

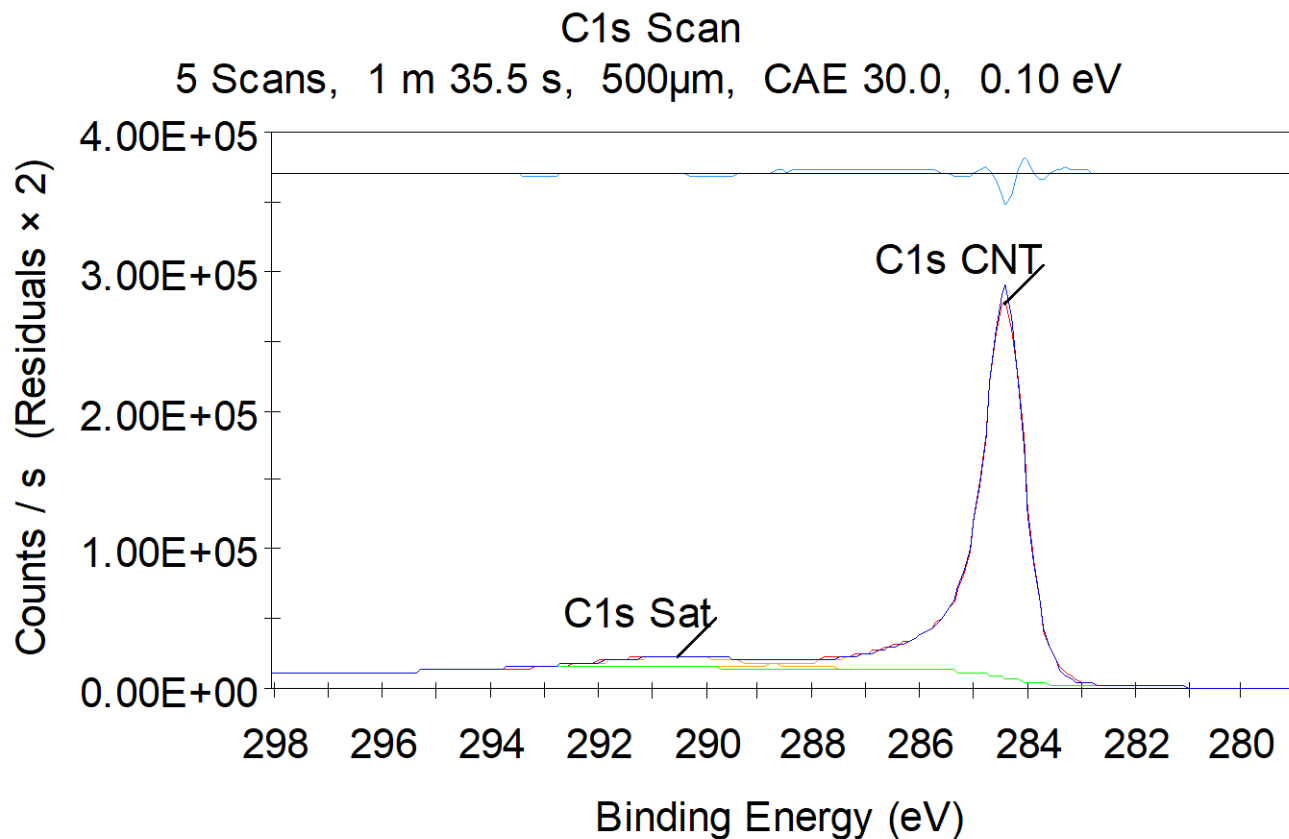


碳纳米管接枝改性系列样品



碳纳米管接枝改性系列样品

Re	Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)	L/G Mix (%) Convolve	Tail Mix (%)	Tail Height (%)	Tail Exponent
C	C1s Graphene	284.41	331943.64	1.00	364838.37	1.00	0.74	18.53	53.00	0.00	0.1084
							0.5 : 3.5				
D	C1s Sat	290.46	4961.42	0.01	17429.25	0.05	3.00	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 3	fixed	fixed	fixed	fixed

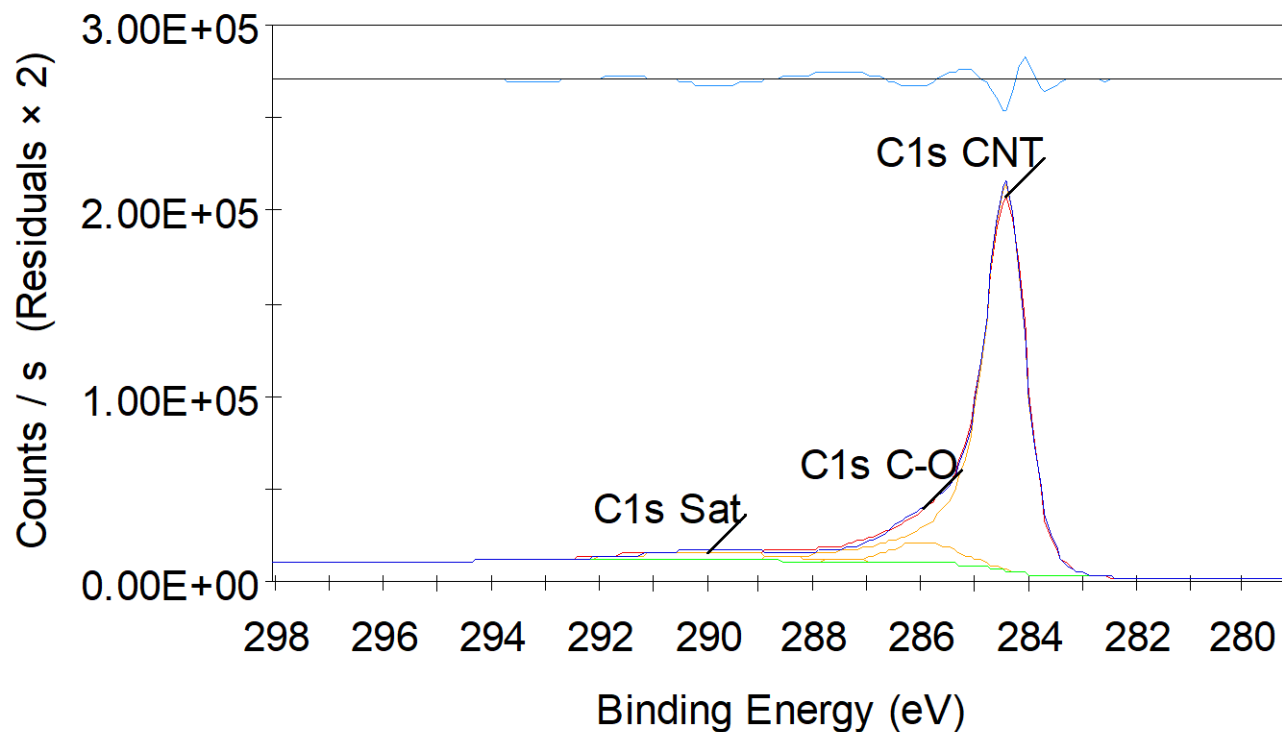


碳纳米管接枝改性系列样品

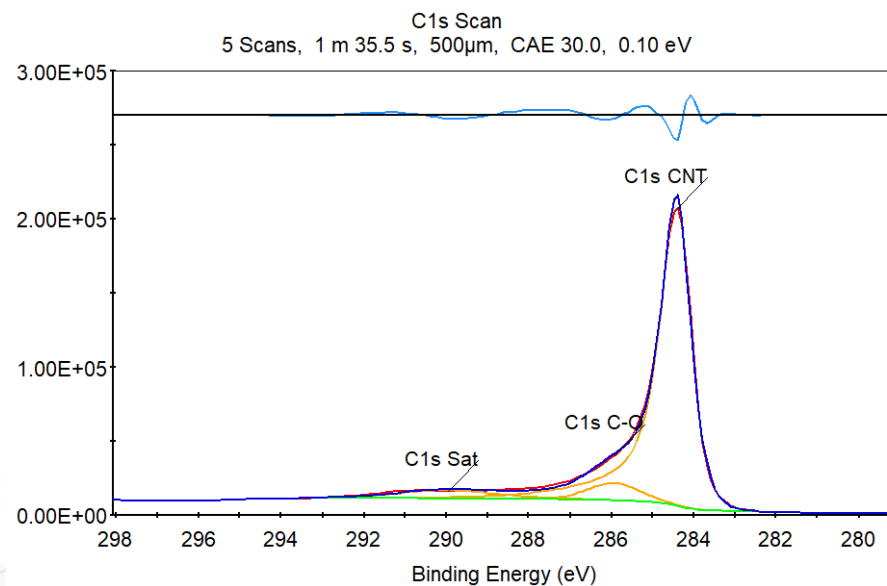
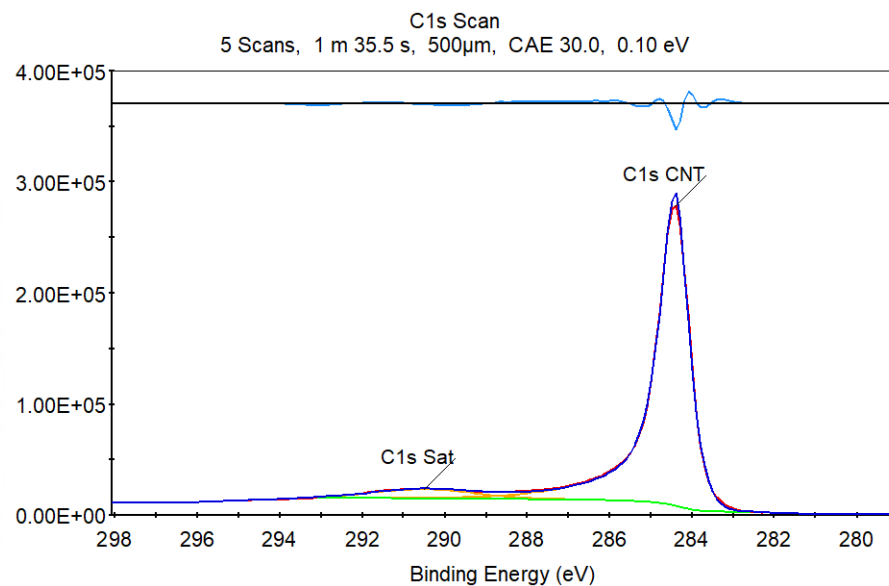
Re	Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)	L/G Mix (%) Convolve	Tail Mix (%)	Tail Height (%)	Tail Exponent
G	C1s CNT	284.39	198335.62	1.00	237494.83	1.00	0.84	18.53	53.00	0.00	0.1084
							0.5 : 3.5	fixed	fixed	fixed	fixed
H	C1s Sat	289.64	5424.75	0.03	19074.26	0.08	3.00	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 3	fixed	fixed	fixed	fixed
I	C1s C-O	286.12	12165.03	0.06	21408.42	0.09	1.50	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 1.5	fixed	fixed	fixed	fixed

C1s Scan

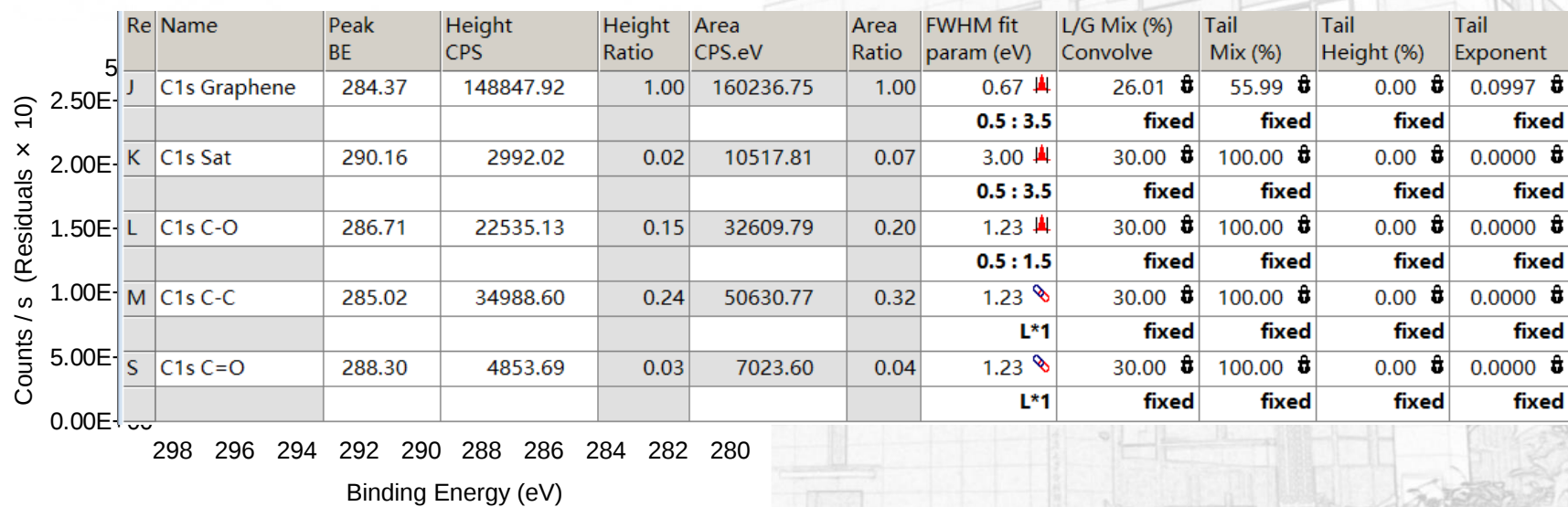
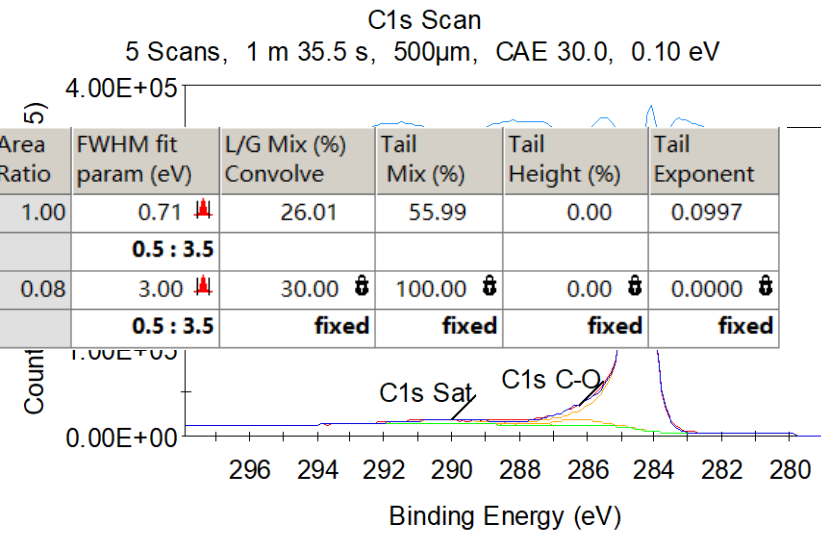
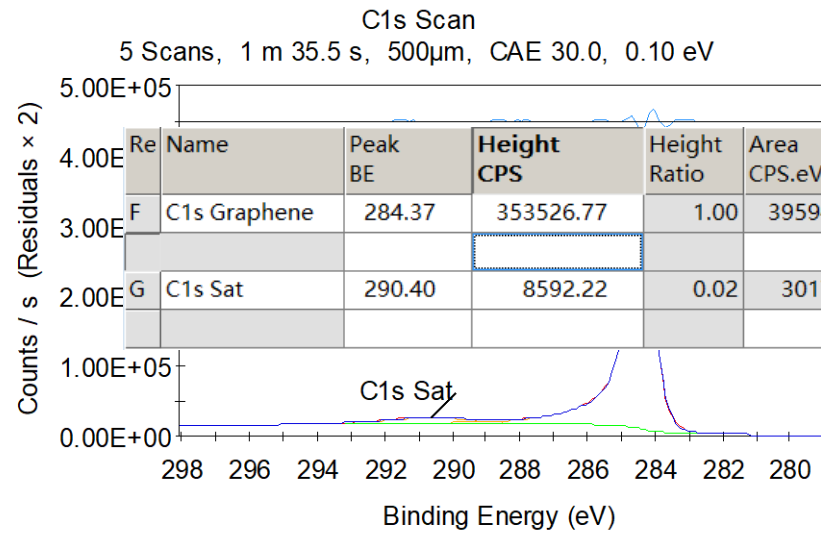
5 Scans, 1 m 35.5 s, 500 μ m, CAE 30.0, 0.10 eV



碳纳米管接枝改性系列样品



氧化还原石墨烯系列样品



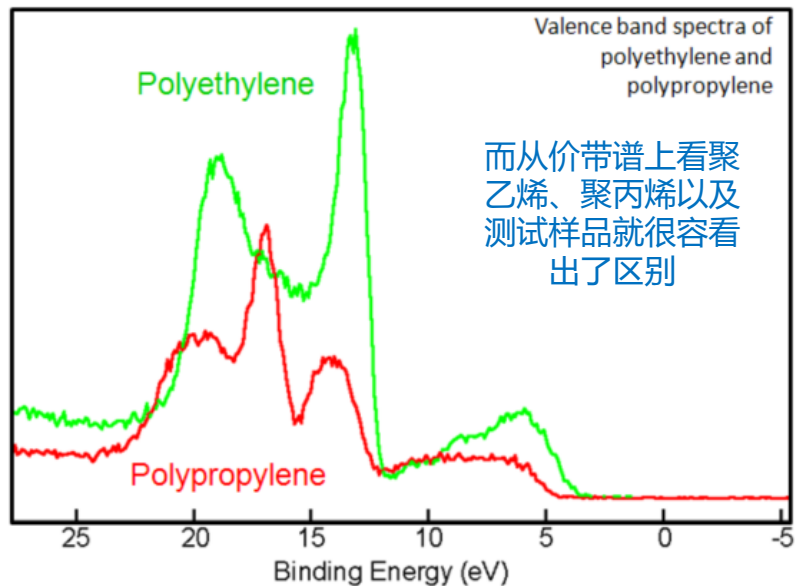
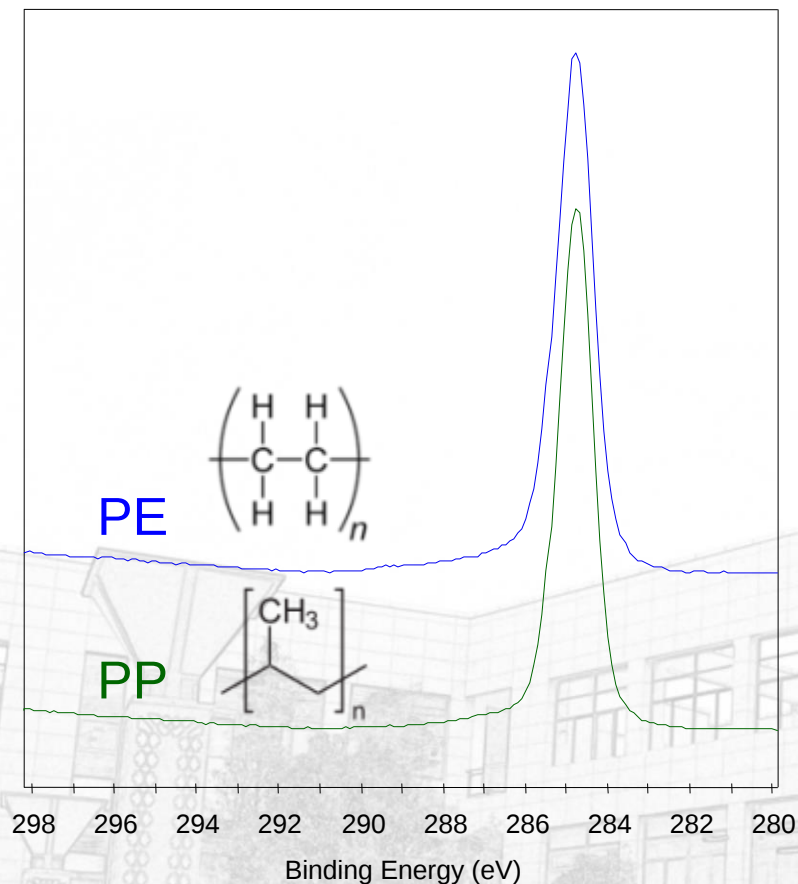
NLSSF_非线性最小二乘拟合

- NLSSF是一种拟合功能。这种方法仅除了通过线性改变因子的Intensity强度来得到最好的拟合结果外，还可以通过shift子元素图谱的能量坐标（非线性项）来进行优化拟合。
- 通过将参考谱图载入到Avantage软件中来指定其作为NLSSF分析的子元素，通过NLSSF来分析一些共混物材料，或者在一些元素的XPS峰和俄歇峰有重合时，将这些元素的XPS峰从中剥离出来，以提高化学态分析定量分析的精度



复杂高分子碳材料——价带谱分析

C1s 谱比较

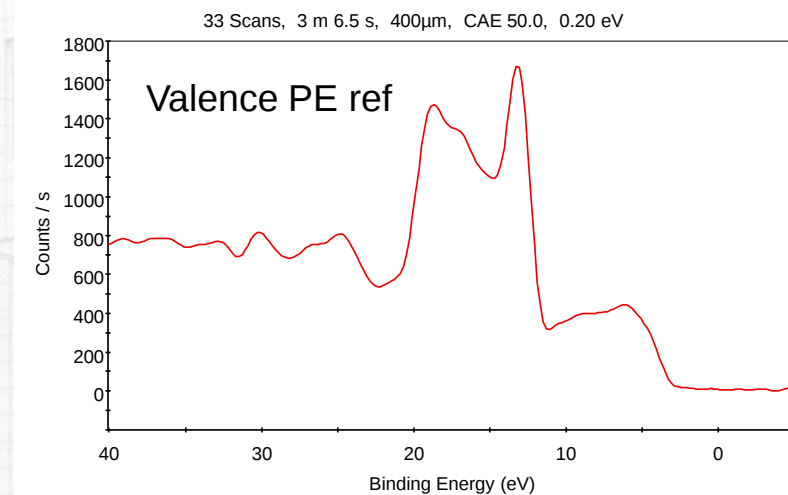
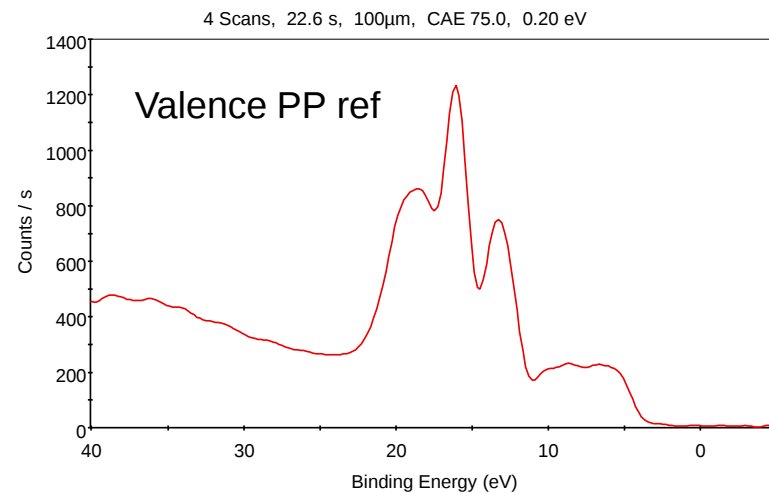
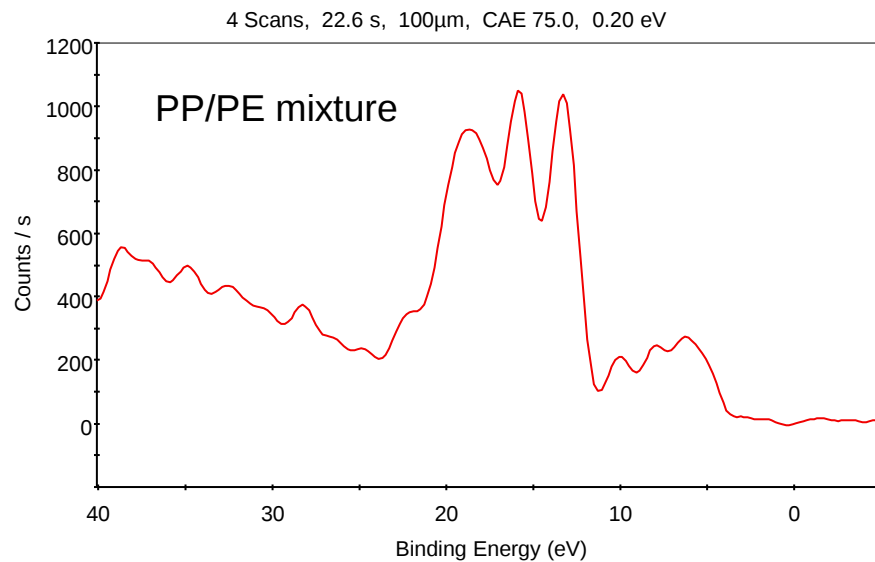


而从价带谱上看聚乙烯、聚丙烯以及测试样品就很容易看出了区别

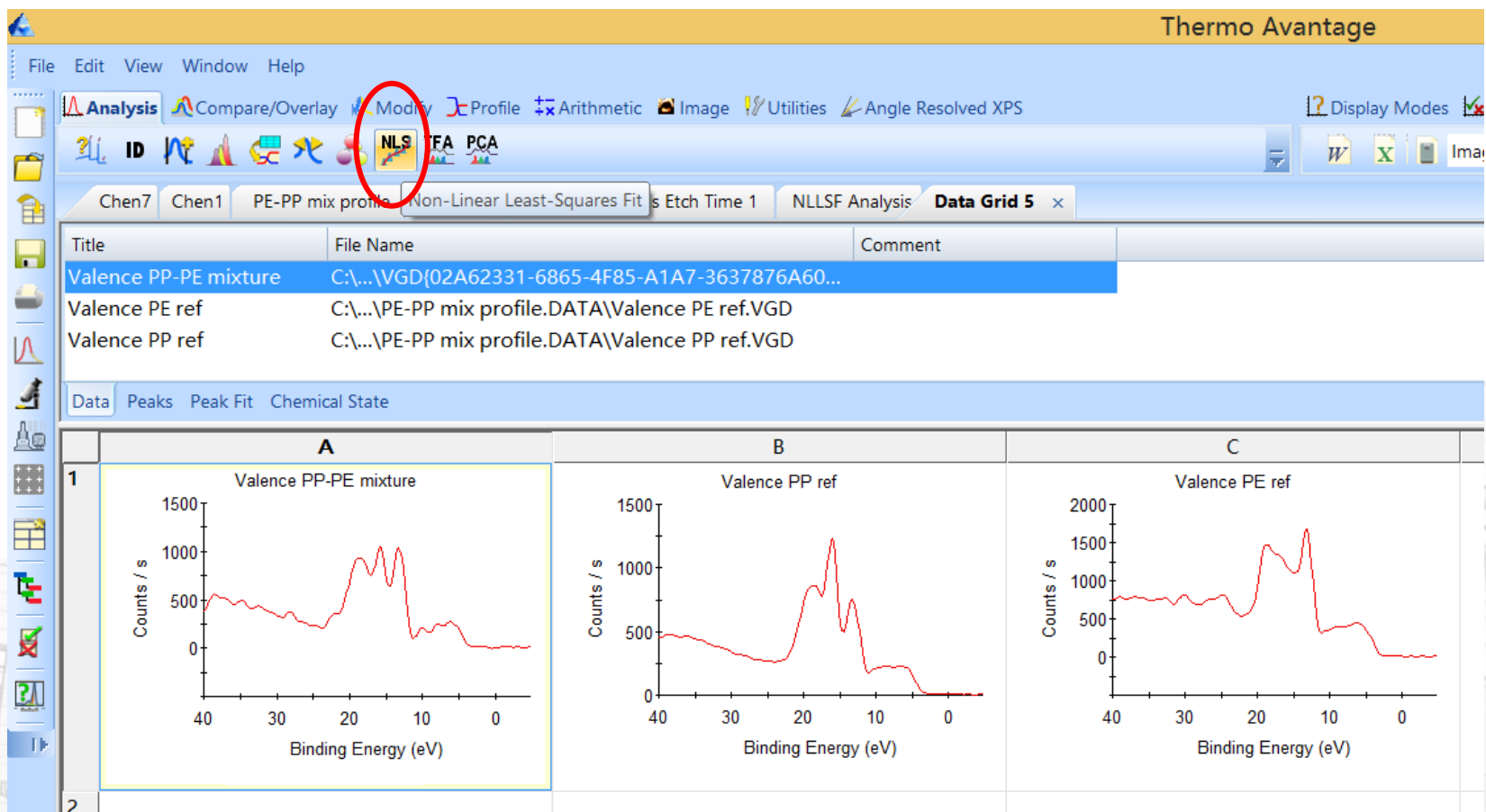
从芯能级C1s谱来看，聚乙烯、聚丙烯以及测试样品的谱都非常相似

因此通过C1s谱的信息我们不能来区分CH₂键和CH₃键

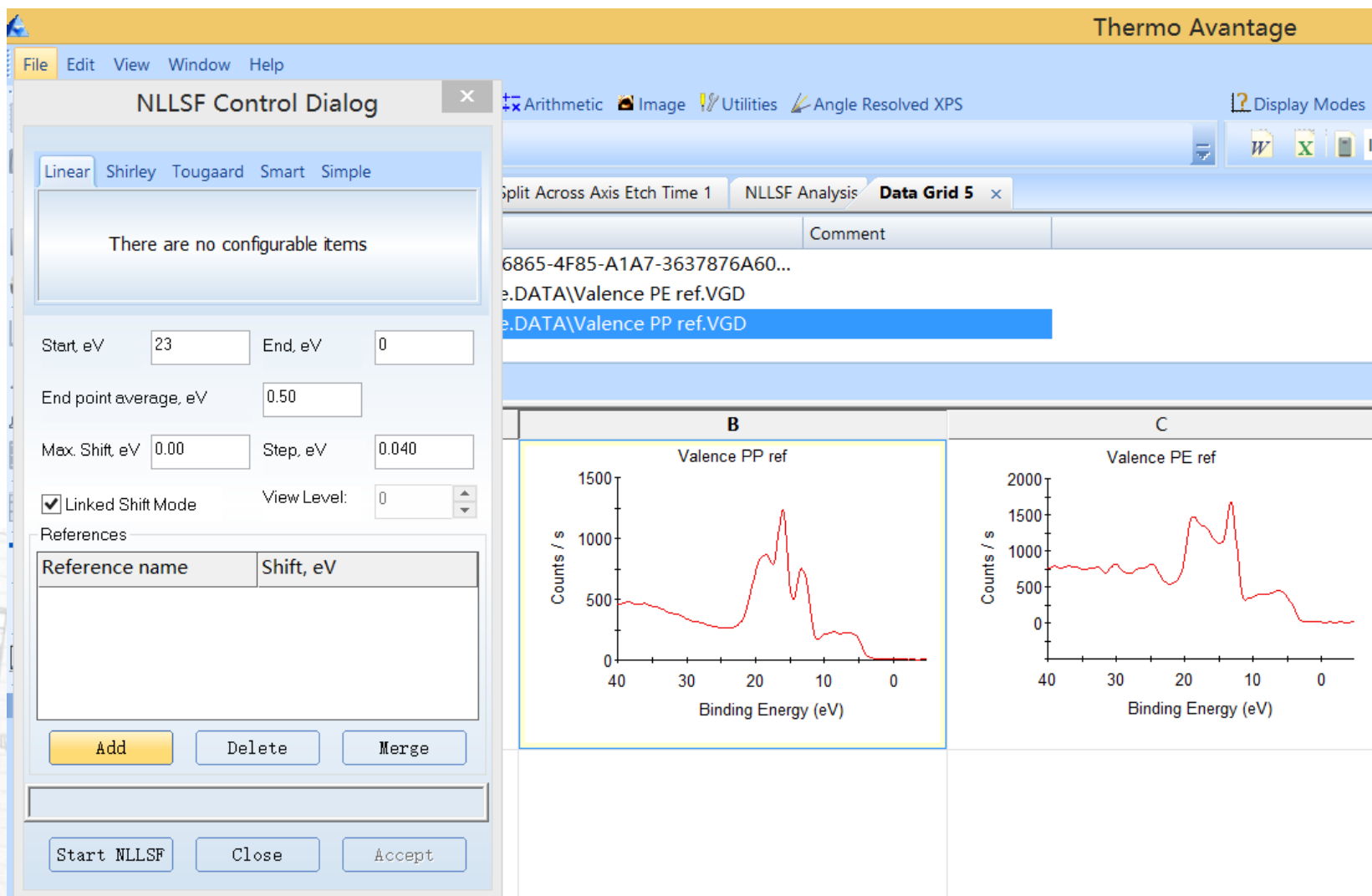
高分子共混聚集体价带谱分析——NLLSF



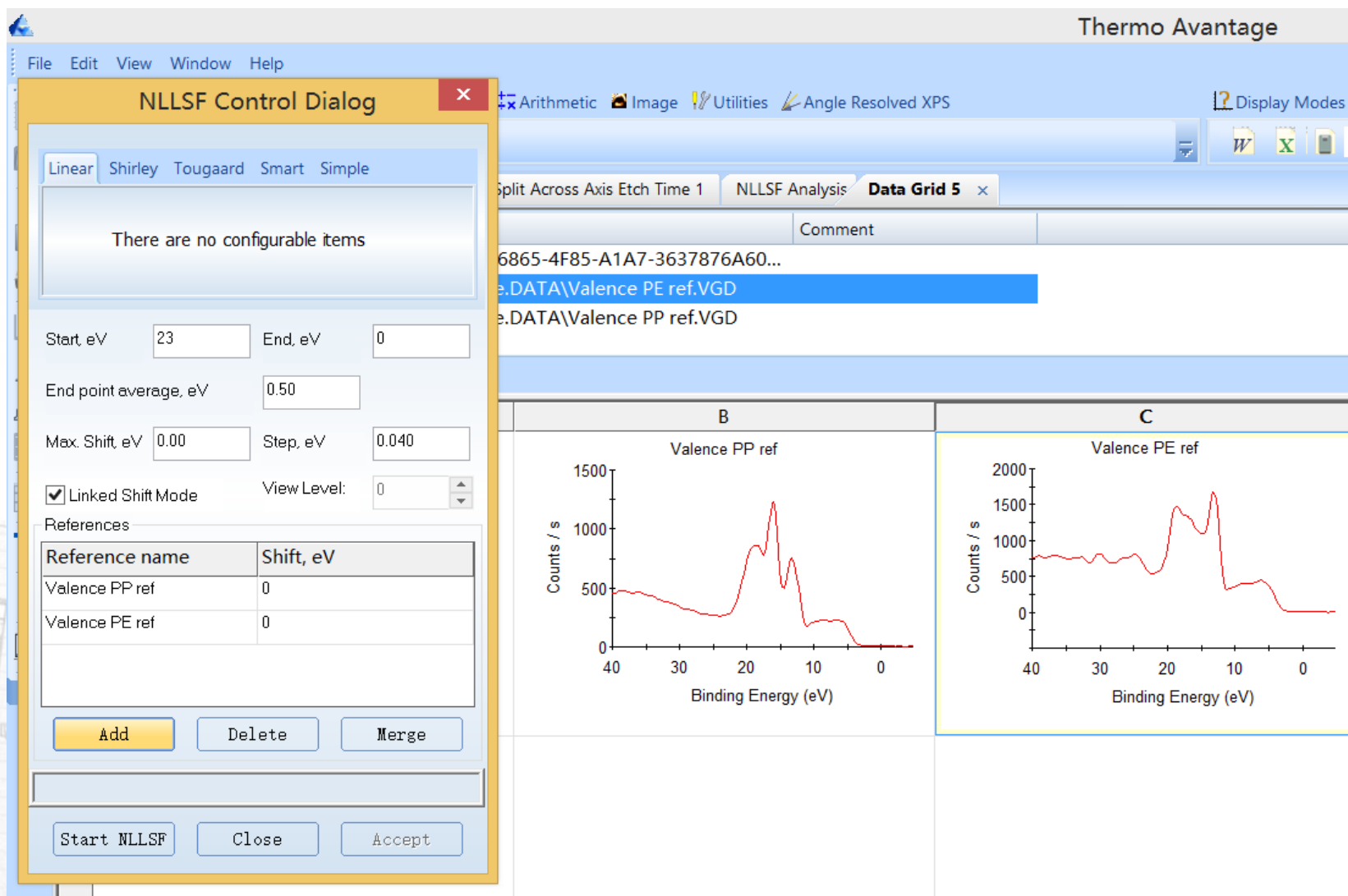
高分子共混聚合物价带谱分析——NLLSF



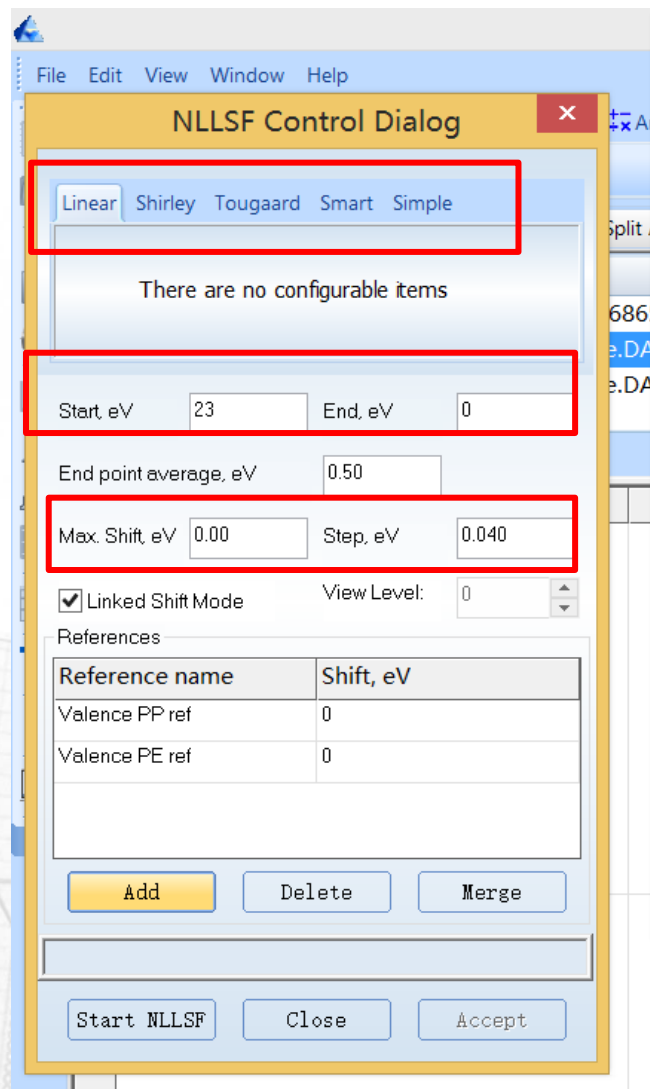
高分子共混聚合物价带谱分析——NLLSF



高分子共混聚合物价带谱分析——NLLSF



高分子共混聚合物价带谱分析——NLLSF



- 点击NLLSF拟合键之后，出来一个对话框
- 最上方是背景选择
- 其次是拟合范围
- 谱图允许移动范围以及步长精度

高分子共混聚合物价带谱分析——NLLSF

NLLSF Control Dialog

Linear Shirley Tougaard Smart Simple

There are no configurable items

Start, eV 23 End, eV 0

End point average, eV 0.50

Max. Shift, eV 2 Step, eV 0.02

☐ Linked Shift Mode View Level: 0

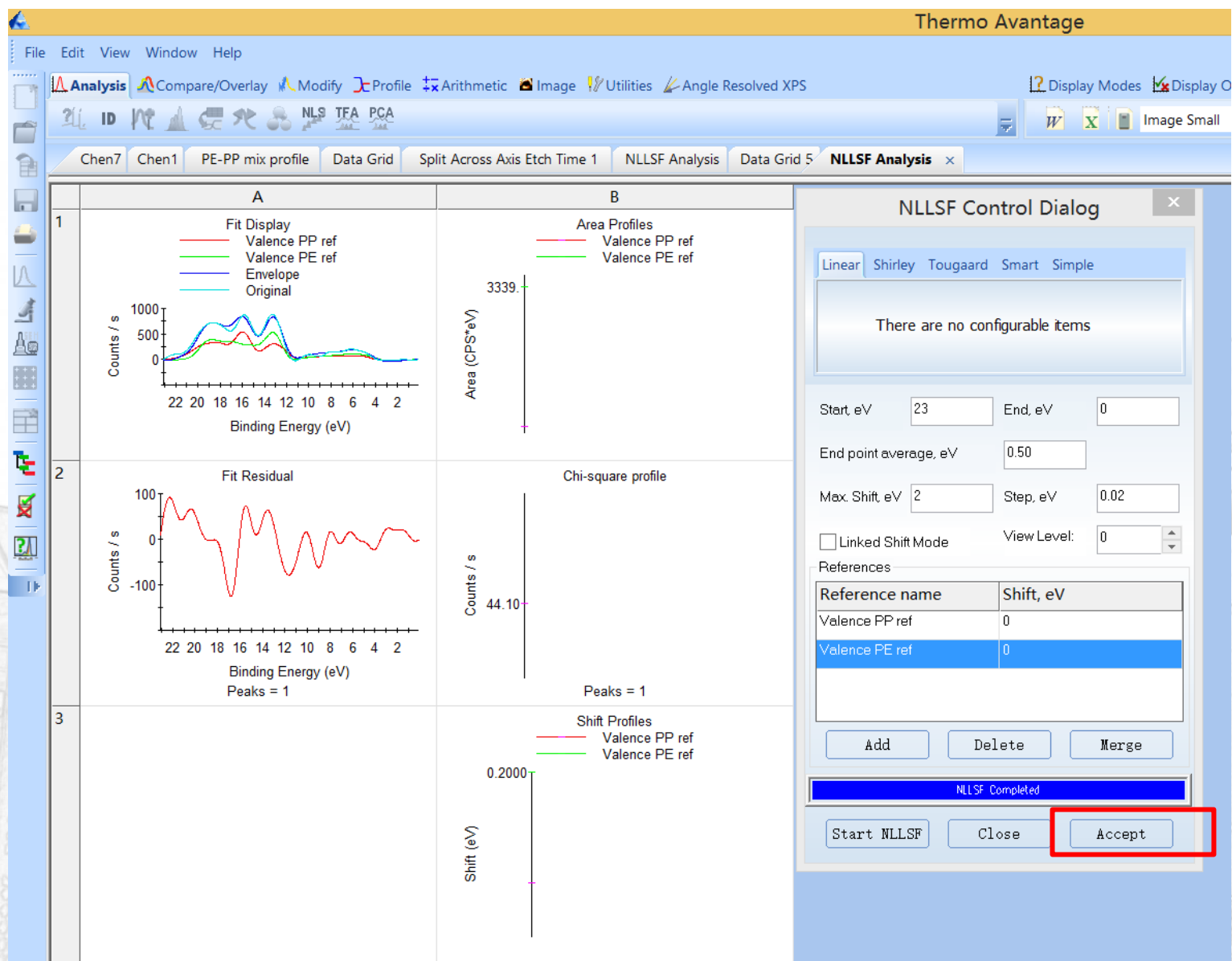
Reference name	Shift, eV
Valence PP ref	0
Valence PE ref	0

Add Delete Merge

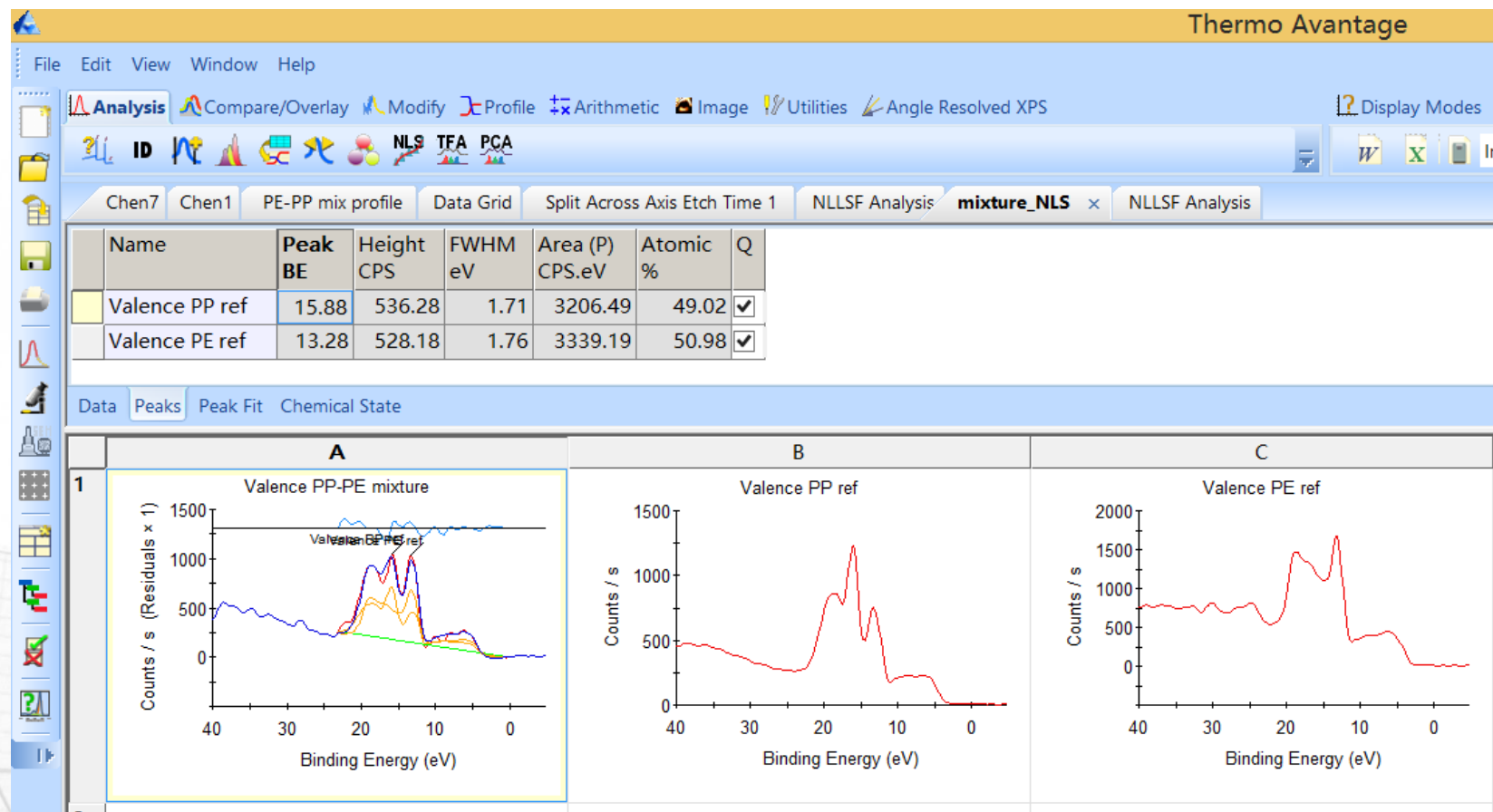
Start NLLSF Close Accept

- 点击NLLSF拟合键之后，出来一个对话框
- 最上方是背景选择——因为参考图谱带有背景信息，因此选用linear
- 其次是拟合范围——去掉一些非特征范围，缩小范围
- 谱图允许移动范围以及步长精度——可以适当放大允许拟合时，参考图谱的左右移动范围

高分子共混聚合物价带谱分析——NLLSF

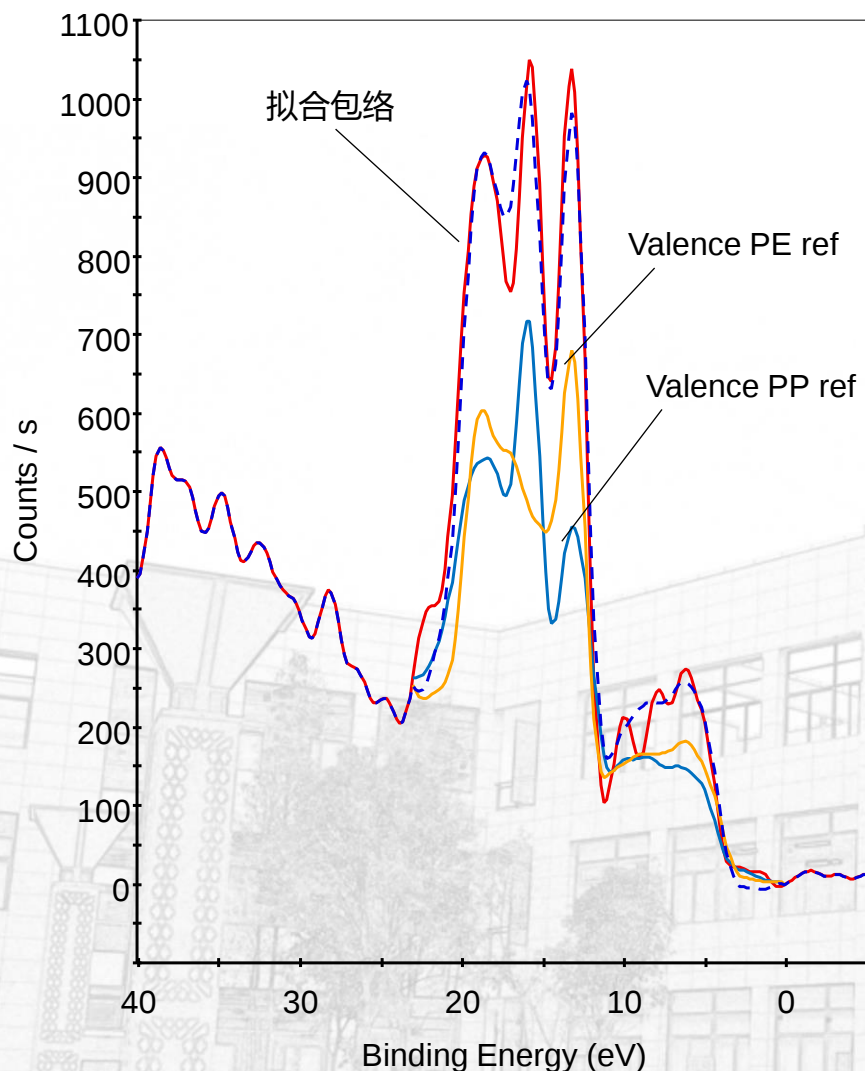


高分子共混聚合物价带谱分析——NLLSF



高分子共混聚合物价带谱分析——NLLSF

Valence PP-PE mixture



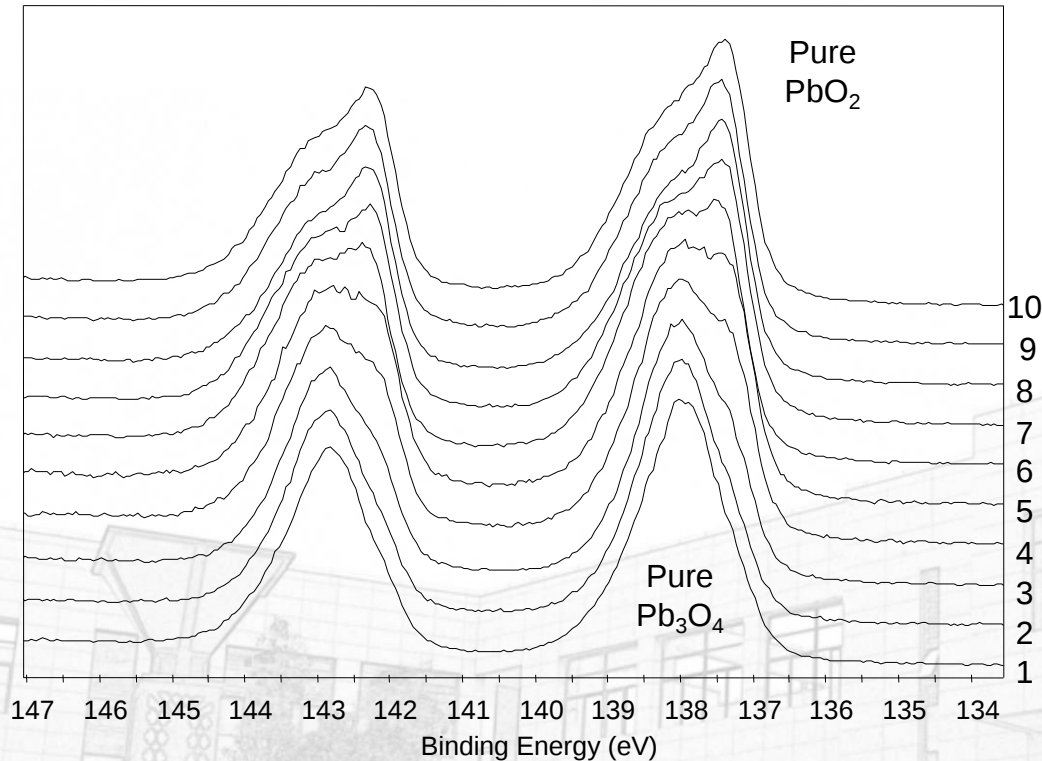
■ 价带谱分析PP/PE 的混合物

• 价带分析

- 测试样品得到的XPS价带谱以及聚乙烯和聚丙烯标准样品的价带谱
- 测试数据通过使用两种标准样品的标准价带谱来进行最小二乘法拟合
- 得到了很好的拟合结果，而且结果表明测试样品是聚乙烯和聚丙烯的混合物，是他们的函数
- 而且从图谱拟合可以得到PE和PP的比例约为1: 1

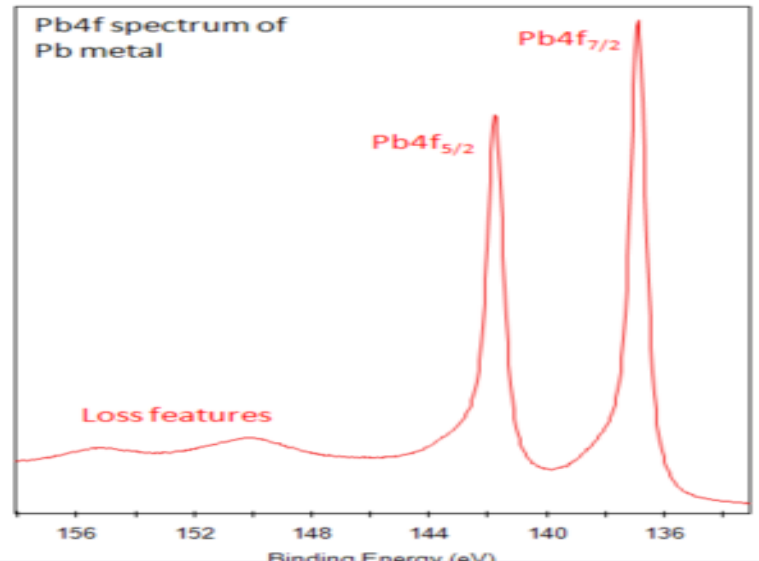
系列Pb₃O₄样品化学组成随光照的变化

Pass energy=5eV Pb4f spectra from Samples 1-10

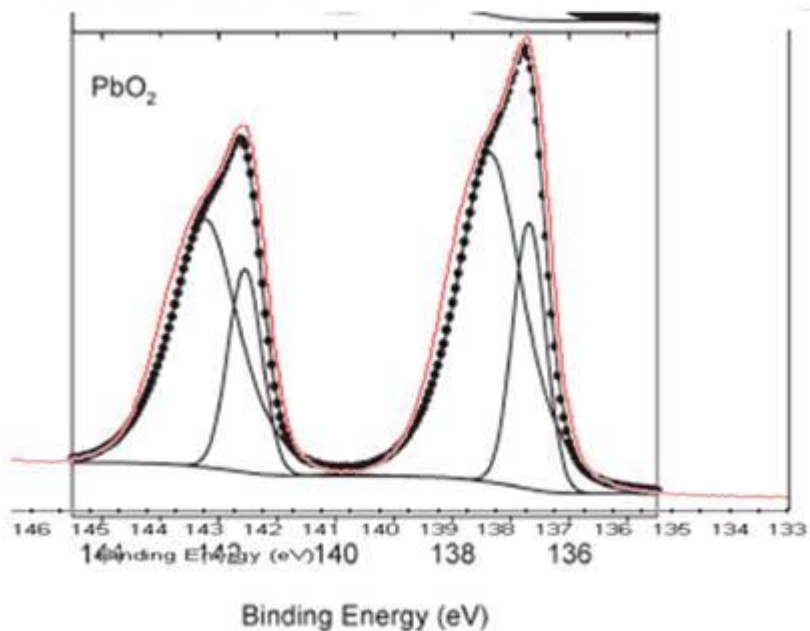


系列样品的Pb4f图谱，XRD数据表明，从最开始的1号样品，PbO₂成分0%到最后10号样品100%

Pb化学的图谱特殊性



- 根据文献的报道和实验的测试，PbO₂的XPS谱并不是一个简单的双峰结合，其图谱是一个不对称的图形，如左图是将我们实测的10号样品和文献中的PbO₂的XPS谱进行比较，发现重合的相当好，因此10号样品已经完全被氧化成了PbO₂。



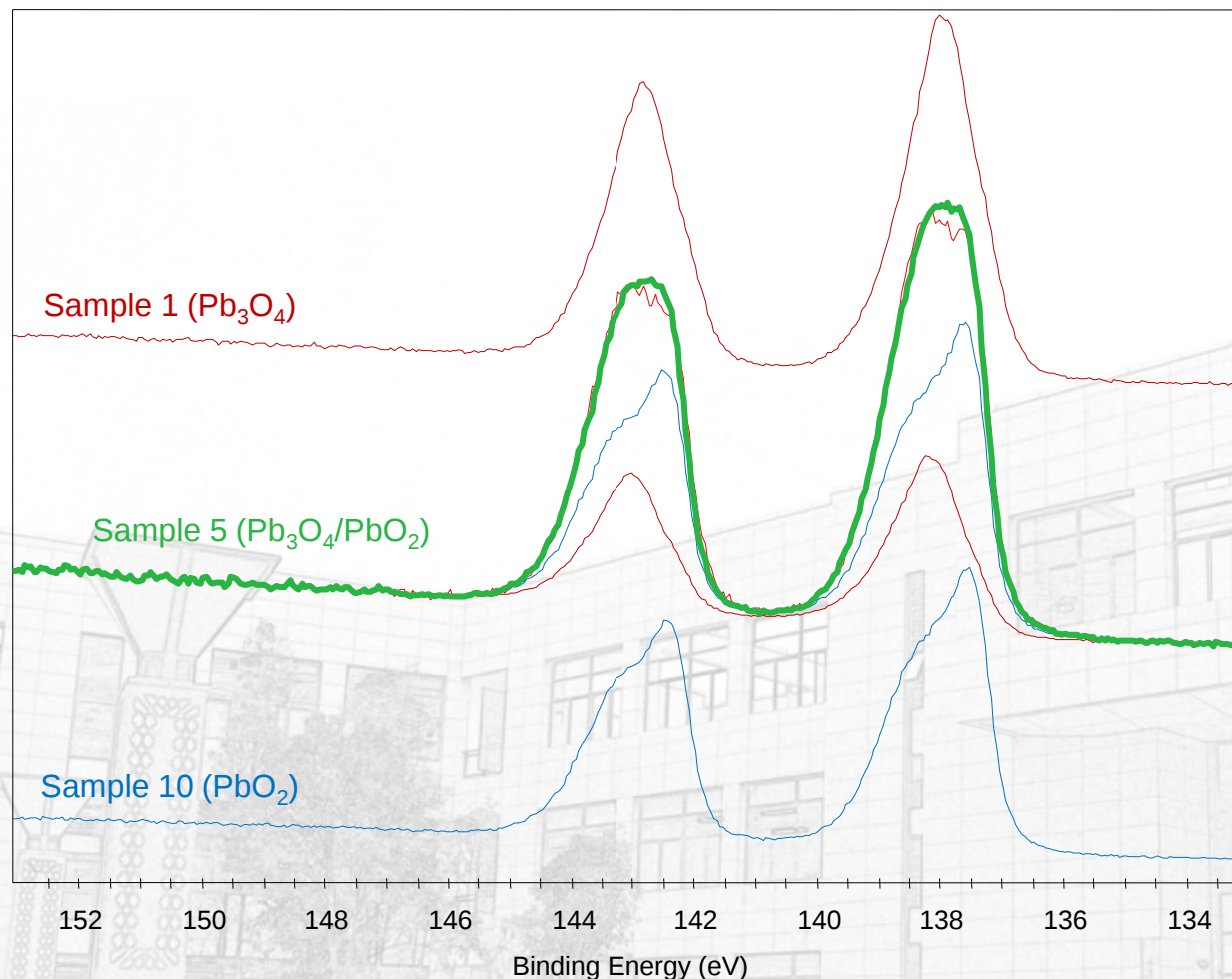
这主要是因为Pb是金属，很容易在表面产生等离子体，而使得XPS主峰往高能拖尾形成不对称峰形。

PbO₂也是金属性的，也会造成这种不对称现象。这一点，文献中也有报道。

Samples 1, 5 & 10

Pb_3O_4 and PbO_2 quantification

Pass energy=5eV Pb4f spectra from Samples 1, 5 & 10



- 所有的数据都根据 Pb_3O_4 和 PbO_2 的标准谱进行非线性拟合

- 如左图所示，是对5号样品进行的非线性拟合实例，其中红色成分是 Pb_3O_4 比例，蓝色成分是 PbO_2 比例

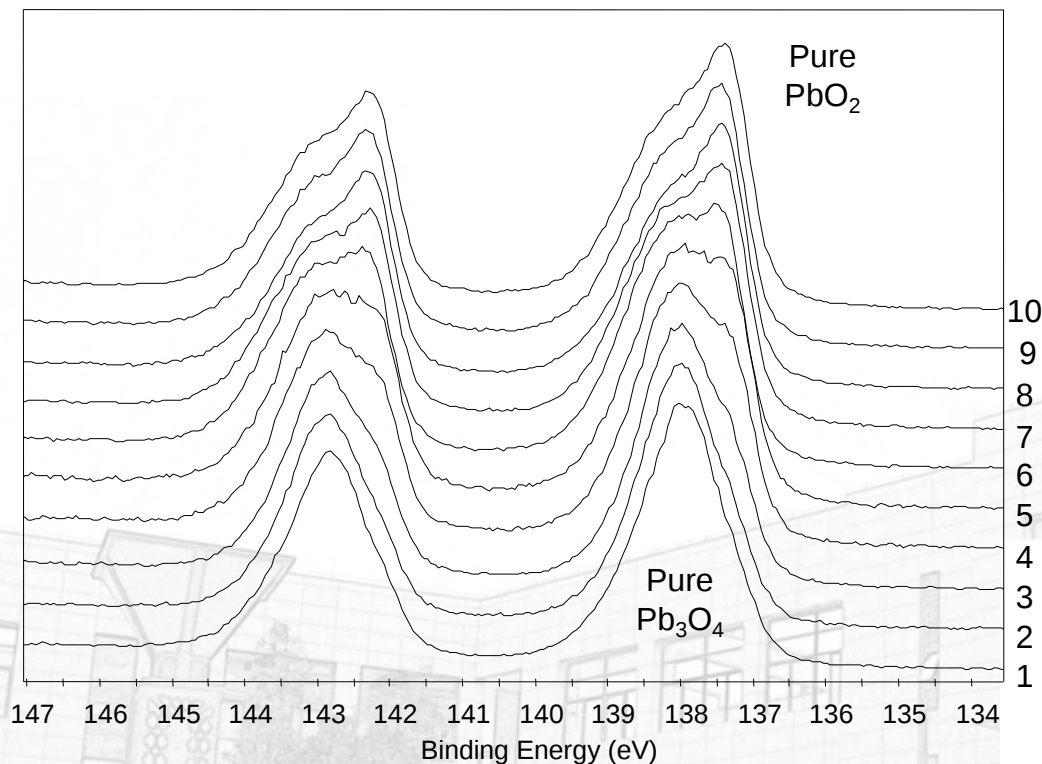
- 实验和理论表明 PbO_2 的标准谱不是简单的高斯/洛伦兹线型，而是比较复杂的飞堆成图形，而且之前也说明，对比我们的实测数据和文献比较，表明10号样品的是比较纯的 PbO_2 成分

- This agrees with published literature about XPS of PbO_2 [DJ Payne et al., *Chemical Physics Letters* 411 (2005) 181–185]

Samples 1-10

Pb_3O_4 and PbO_2 quantification

Pass energy=5eV Pb4f spectra from Samples 1-10



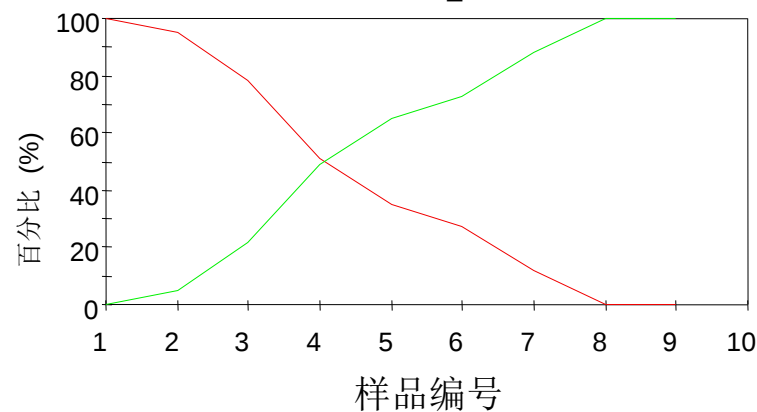
定量拟合分析表明，由1→10号样品，
Pb 4f对应 PbO_2 的谱重比例逐渐增强，从
最开始的1号样品， PbO_2 成分0%到最后
10号样品100%

Sample	% Pb_3O_4	% PbO_2
1	100.0	0.0
2	94.62	5.38
3	78.18	21.82
4	50.83	49.17
5	35.34	64.66
6	26.41	73.59
7	14.67	85.33
8	3.48	96.52
9	2	98
10	0.0	100.0

Quantification in terms of Pb_3O_4 and PbO_2

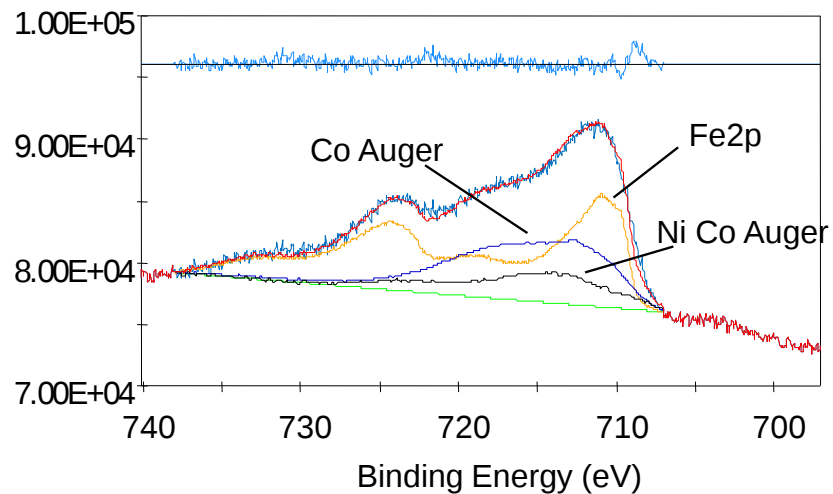
5 Scans, 0.50 s, 500 μ m, CAE 5.0, CAE 5.0

— Pb4f Pb_3O_4 _ref
— Pb4f PbO_2 _ref

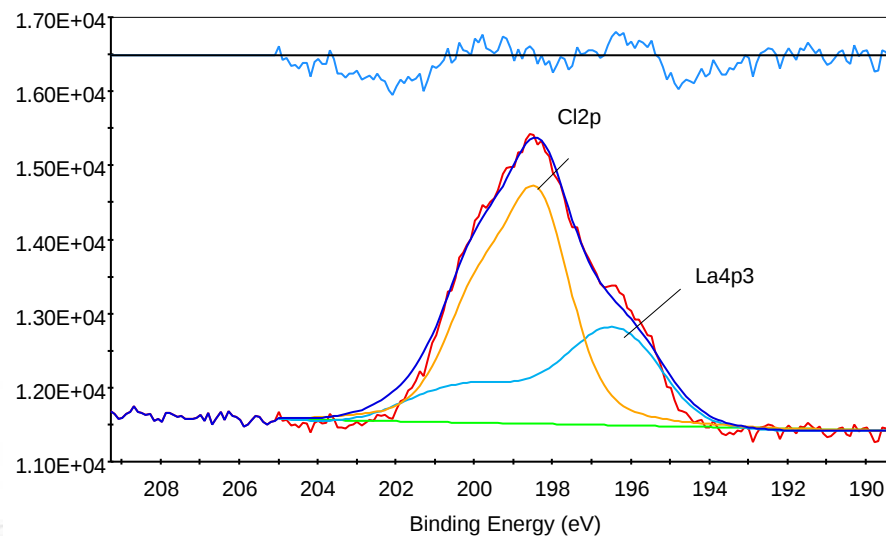


其他示例

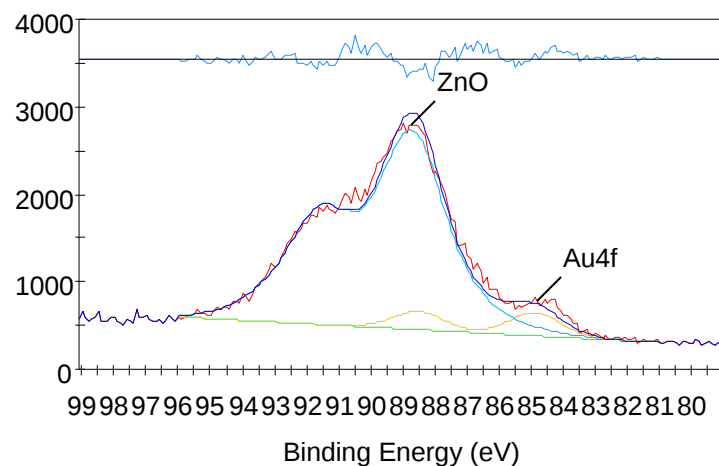
Fe2p Scan



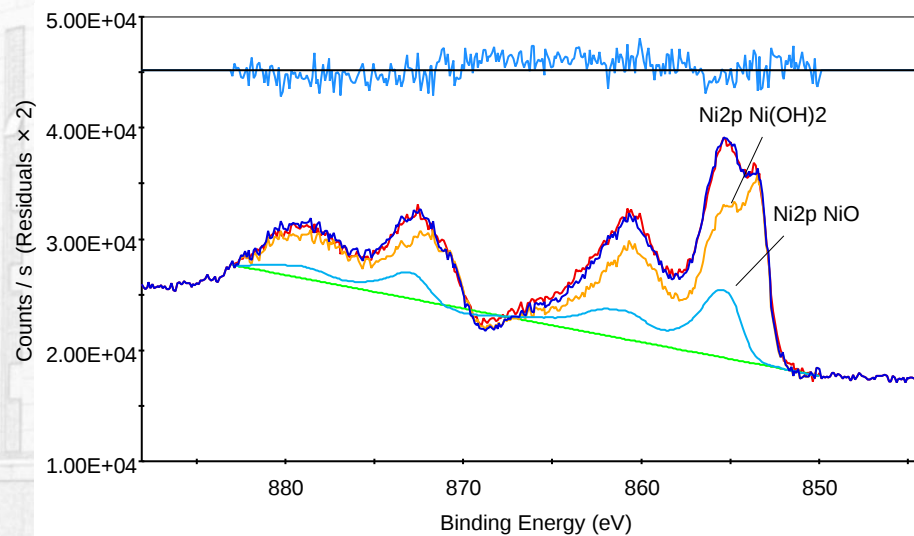
Cl2p Scan



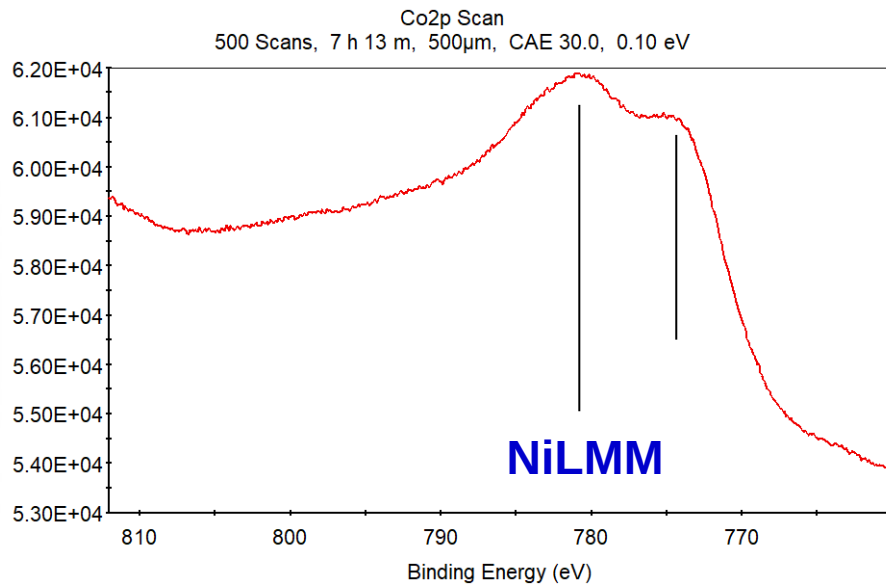
Au4f Scan



Ni2p Scan



Co2p/NiLMM on NTO

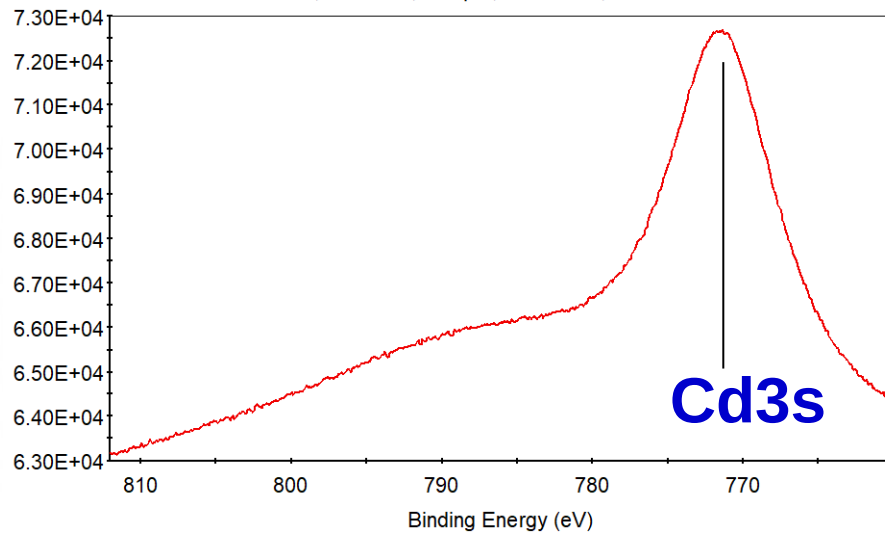


Chemical state	Binding energy Co2p _{3/2} / eV
Co metal	778.2
Co ₃ O ₄	779.7
CoO	779.7

没有明显的Co信号, 该处峰型谱重来源主要是NiLMM的俄歇峰信号

Cd3s on CdS

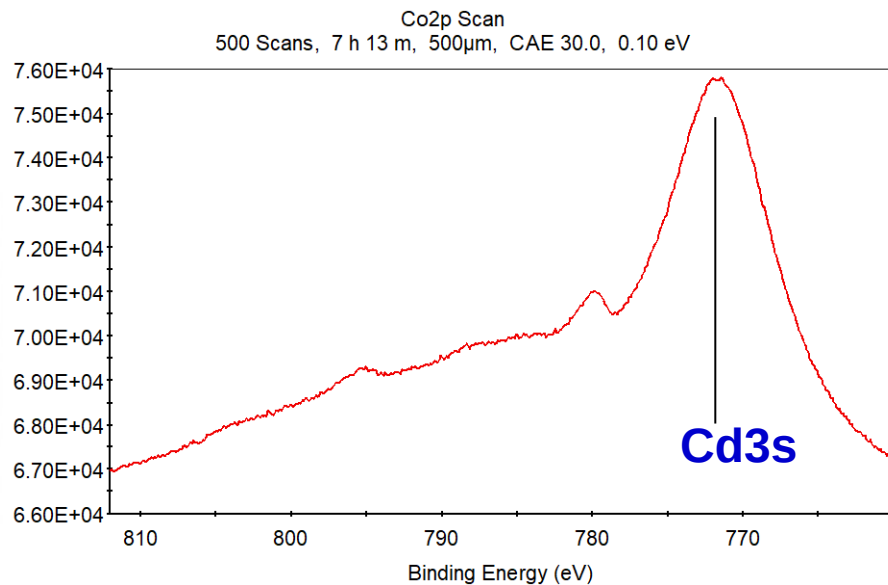
Co2p Scan
500 Scans, 7 h 13 m, 500 μ m, CAE 30.0, 0.10 eV



Chemical state	Binding energy Co2p _{3/2} / eV
Co metal	778.2
Co ₃ O ₄	779.7
CoO	779.7

没有明显的Co元素信号，该处峰位主要是Cd3s的峰型

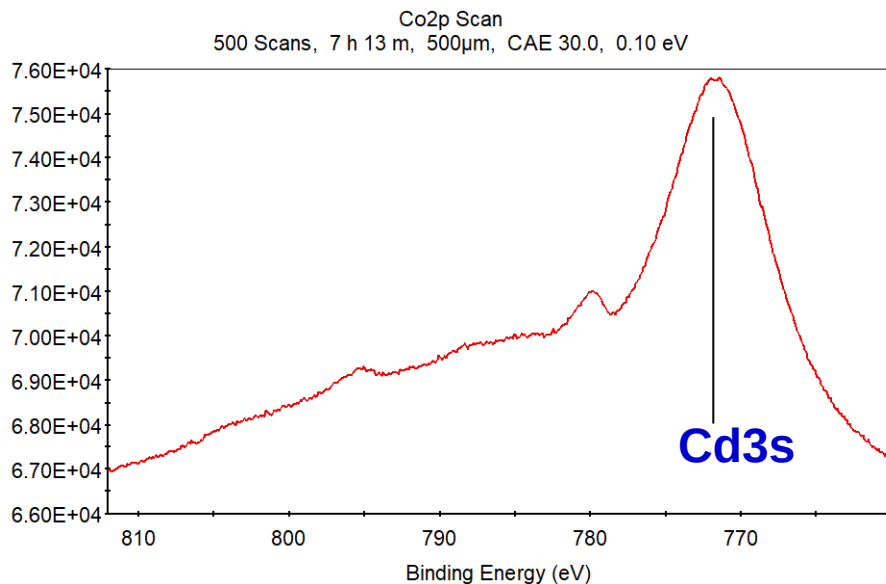
Cd3s on CdS-Co



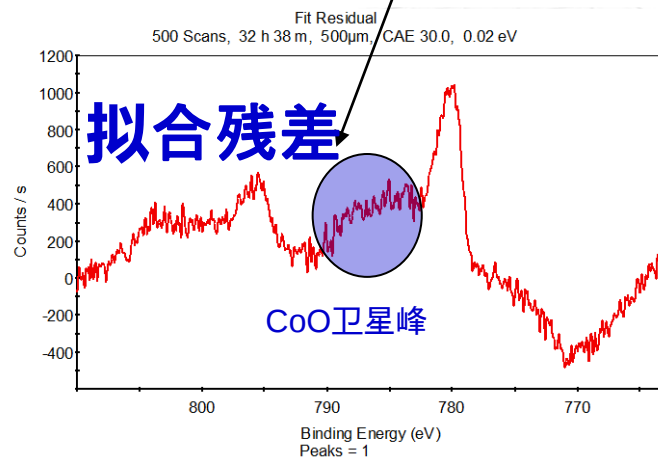
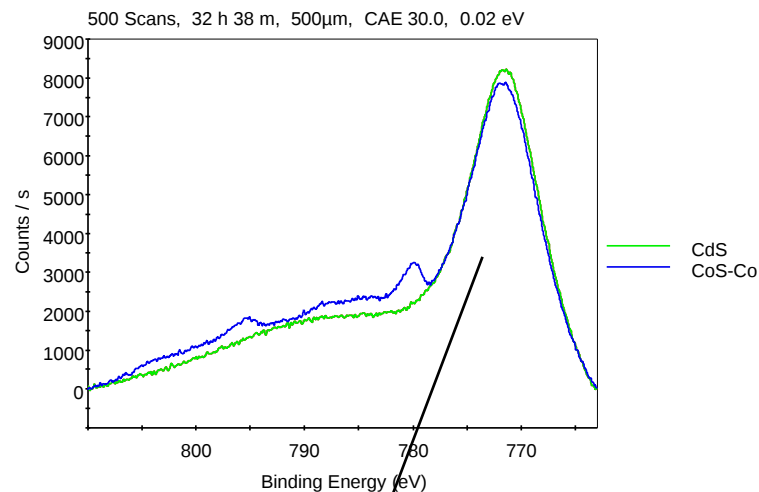
Chemical state	Binding energy Co2p _{3/2} / eV
Co metal	778.2
Co ₃ O ₄	779.7
CoO	779.7

虽然受Cd3s峰型影响，但仍可以看到微弱的Co元素信号

对比



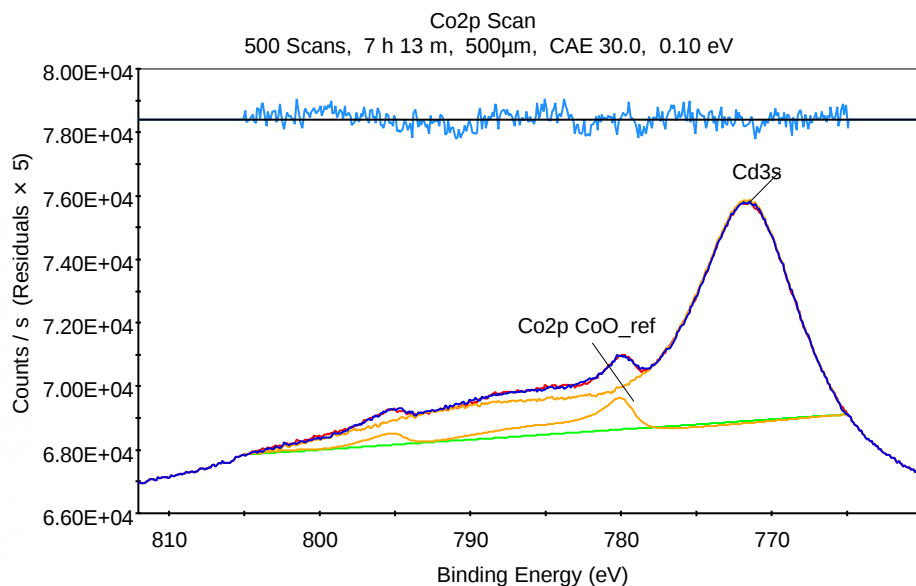
Chemical state	Binding energy Co2p _{3/2} / eV
Co metal	778.2
Co ₃ O ₄	779.7
CoO	779.7



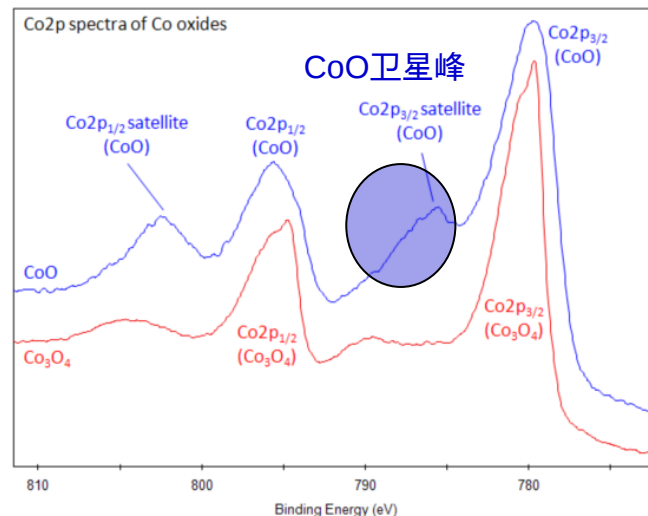
虽然受Cd3s峰型影响，但仍可以看到微弱的Co元素信号
峰形十分明显，结合对比参照样，可以了解其Co化学态接近于CoO形式
取数据库CoO的参考峰型和空白样CdS的峰型进行拟合，可以直接对Co进行定量

注意：该XPS峰型的相互重叠无法通过更换靶材来消除谱峰重叠

拟合



Chemical state	Binding energy Co2p _{3/2} / eV
Co metal	778.2
Co ₃ O ₄	779.7
CoO	779.7



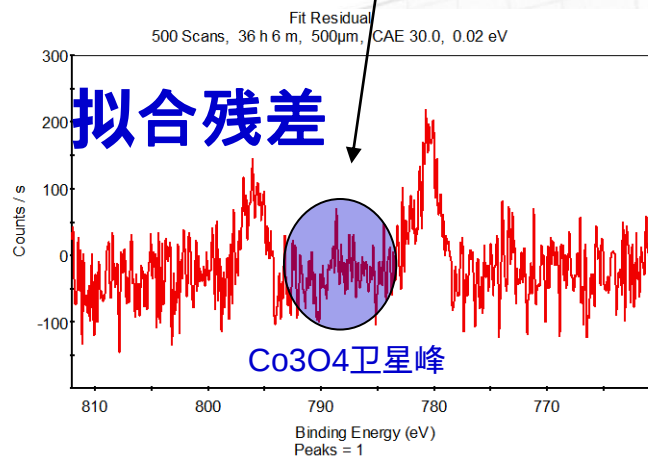
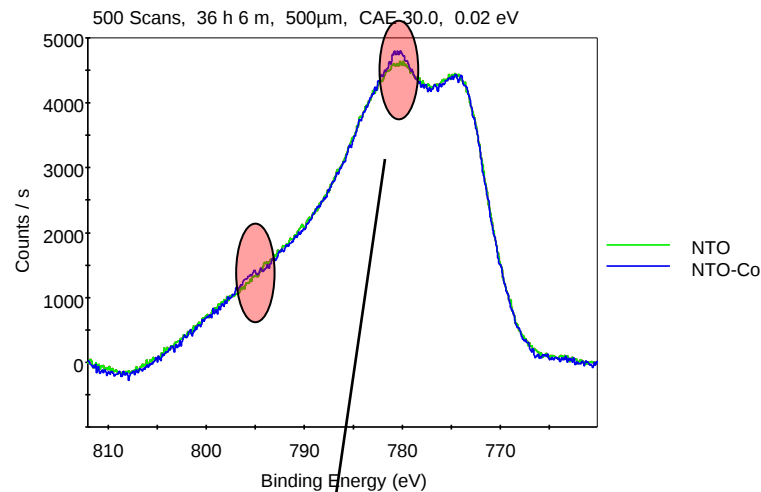
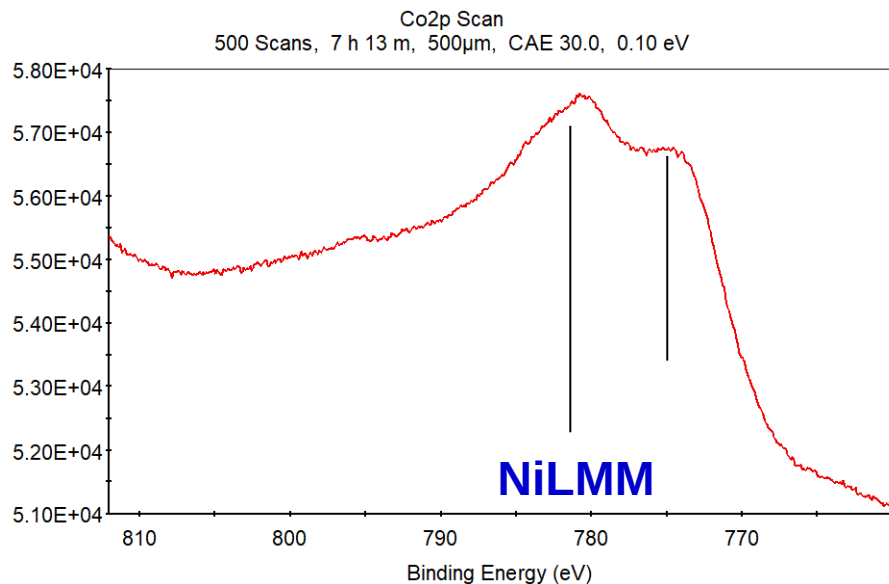
来自Thermo XPS图谱数据库

<http://xpssimplified.com/elements/cobalt.php>

虽然受Cd3s峰型影响，但仍可以看到微弱的Co元素信号
峰形十分明显，结合对比参照样，可以了解其Co化学态接近于CoO形式
取数据库CoO的参考峰型和空白样CdS的峰型进行拟合，可以直接对Co进行定量

注意：该XPS峰型的相互重叠无法通过更换靶材来消除谱峰重叠

对比

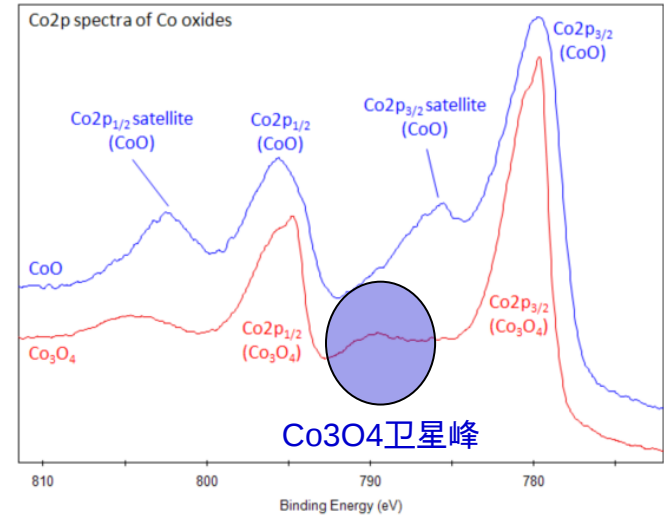
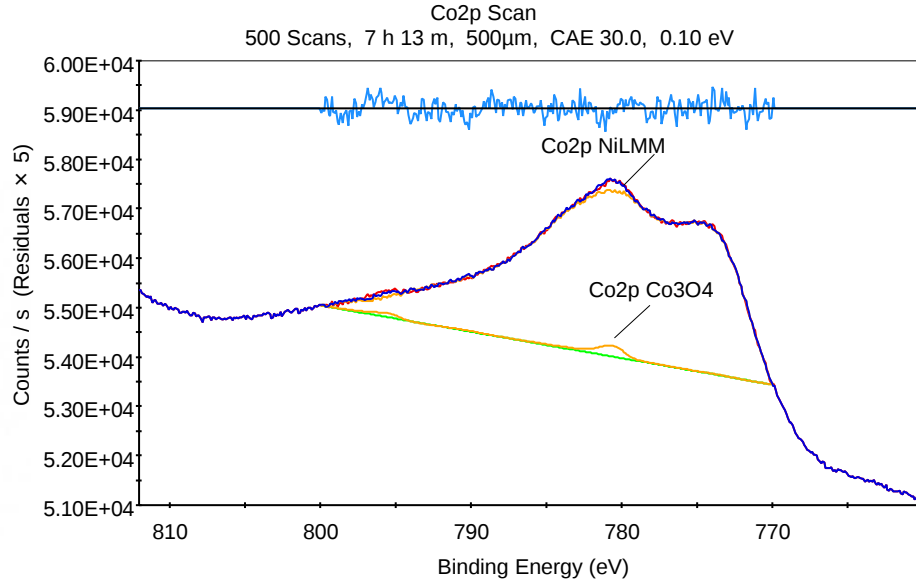


Chemical state	Binding energy Co2p _{3/2} / eV
Co metal	778.2
Co ₃ O ₄	779.7
CoO	779.7

该样品中仍没有明显的Co信号,但是**对比于空白样品NTO时,可以看到明显的差别**,明显的接近于Co₃O₄形式的Co化学态形式

取数据库Co₃O₄的参考峰型和空白样NiLMM的峰型进行拟合,可以直接对Co进行定量

拟合



来自Thermo XPS图谱数据库

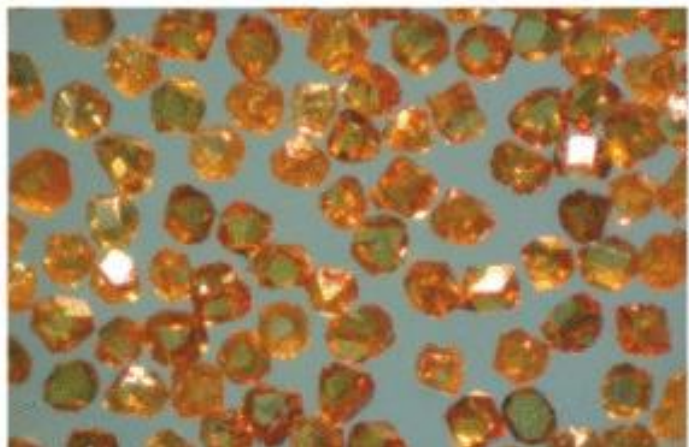
<http://xpssimplified.com/elements/cobalt.php>

该样品中仍没有明显的Co信号,但是**对比于空白样品NTO时,可以看到明显的差别**,明显的接近于Co₃O₄形式的Co化学态形式
取数据库Co₃O₄的参考峰型和空白样NiLMM的峰型进行拟合,可以直接对Co进行定量

Chemical state	Binding energy Co2p _{3/2} / eV
Co metal	778.2
Co ₃ O ₄	779.7
CoO	779.7

案例分析

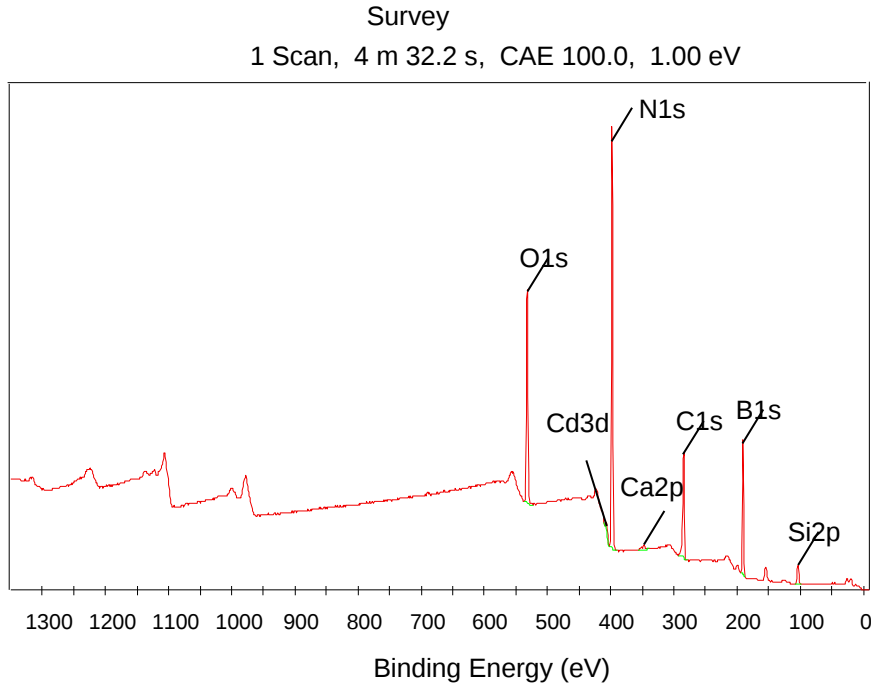
案例1：BN玻璃



■ BN玻璃

- 能源/环境应用
 - 新型的超硬材料
 - 具有极好的润滑性能以及高温稳定性
 - 氮化硼涂料有助于将玻璃制品的表面缺陷减至最低、使之更容易脱模
- 实际问题
 - 氮化硼涂料配方独特，但大多数玻璃不会与氮化硼粘结（影响产品表现性能）
- XPS解决方案
 - XPS检测鉴定表面元素组成和化学态性质

XPS 全谱扫描



■ 分析表面元素组成

• 元素信息

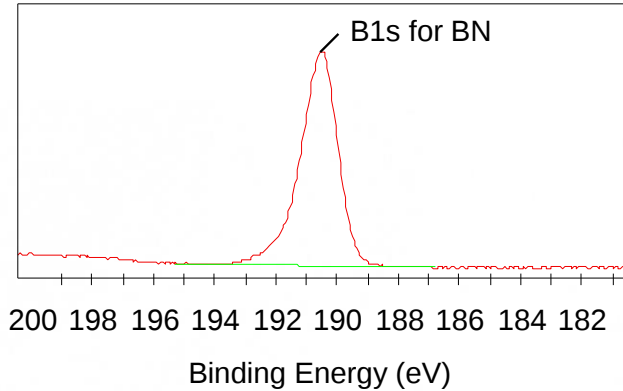
- 主要由N、B组成
- 也探测到了NB涂层下的玻璃主要成分Si、O的信号
- 污染C信号
- 其他微量的Ca、Cd

Name	Atomic %
B	37.5
C	15.2
Ca	0.18
Cd	0.08
N	32.5
O	12.5
Si	2.2

高能量分辨率XPS

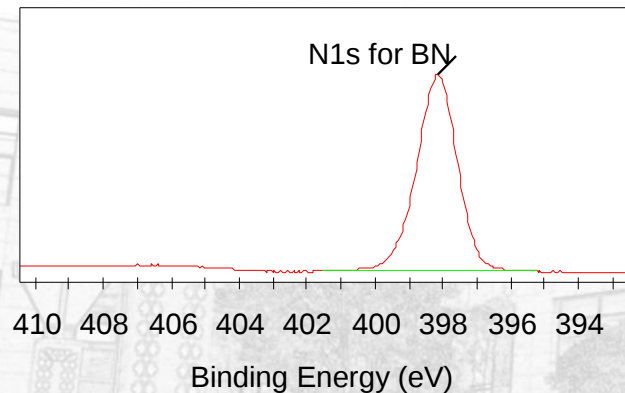
B1s Scan

2 Scans, 1 m 20.2 s, CAE 30.0, 0.05 eV



N1s Scan

2 Scans, 1 m 12.2 s, CAE 30.0, 0.05 eV



■ 分析表面元素化学组成信息

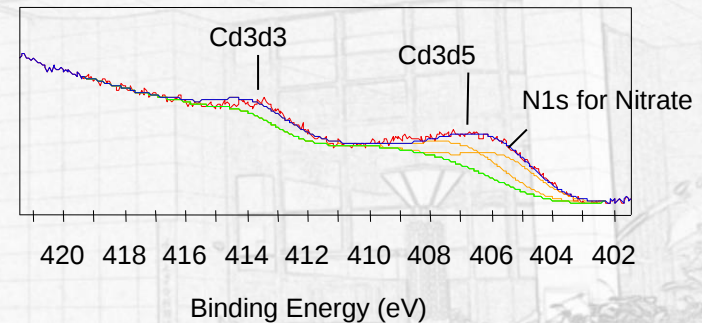
• 元素信息

- N、B表现出明显的BN化学组成
- 预期之外的氧化Cd信号，以及部分硝酸盐的N信号

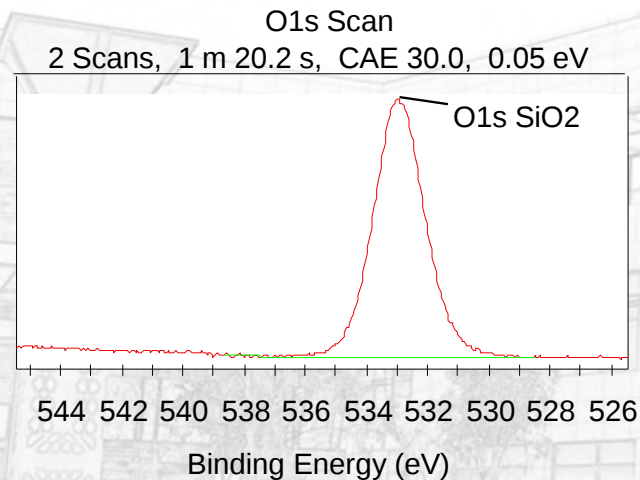
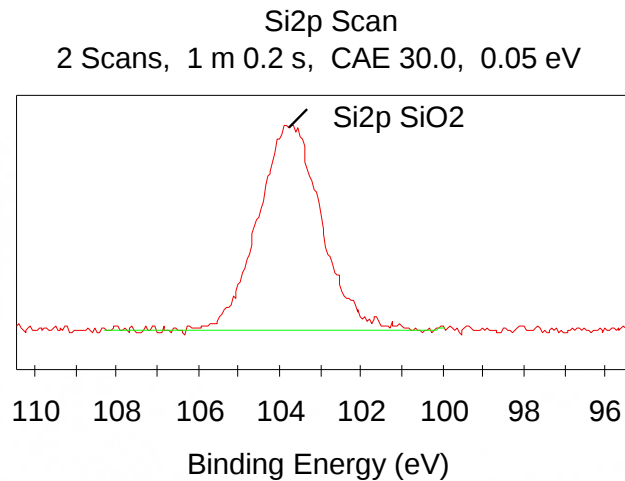
Chemical state	Binding energy N1s / eV
Metal nitrides	~397
NSi ₃ (Si ₃ N ₄)	398.0
NSi ₂ O	399.9
NSiO ₂	402.5
C-NH ₂	~400
Nitrate	>405

Cd3d Scan

2 Scans, 1 m 20.2 s, CAE 30.0, 0.05 eV



高能量分辨率XPS



■ 分析表面元素化学组成信息

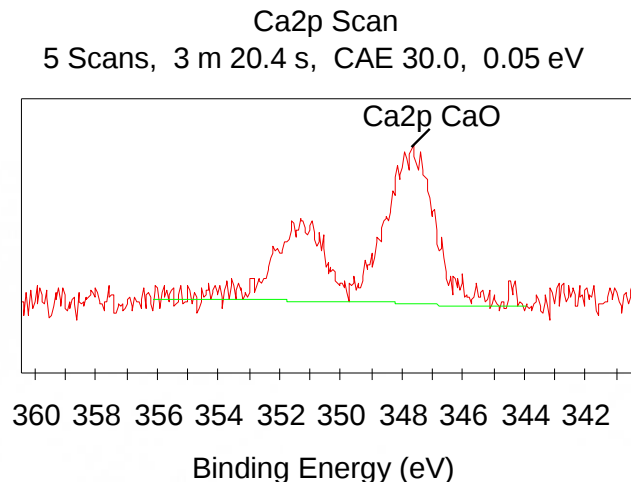
• 元素信息

- N、B表现出明显的BN化学组成
- 预期之外的氧化Cd信号，以及部分硝酸盐的N信号
- 玻璃主要成分SiO₂的信号，化学态信息符合预期

Chemical state	Binding energy Si2p / eV
Si element	99.4
Si ₃ N ₄	101.7
ZrSiO ₄	102.0
Organic Si	~102
Aluminosilicate	102.7
SiO ₂	103.5

Chemical state	Binding energy O1s / eV
Metal oxides	529-530
Metal carbonates	531.5-532
Al ₂ O ₃ (alumina)	531.1
SiO ₂	532.9
Organic C-O	531.5-532
Organic C=O	~533
O-F _x	~535

高能量分辨率XPS



Name	Atomic %
B1s	37.5
C1s for C-C	11.2
C1s for C-N	3.7
C1s for C=O	0.25
Ca2p CaO	0.18
Cd3d5 CdO	0.08
N1s for Nitrate	0.9
N1s for BN	31.5
O1s SiO ₂	12.5
Si2p SiO ₂	2.2

■ 分析表面元素化学组成信息

• 元素信息

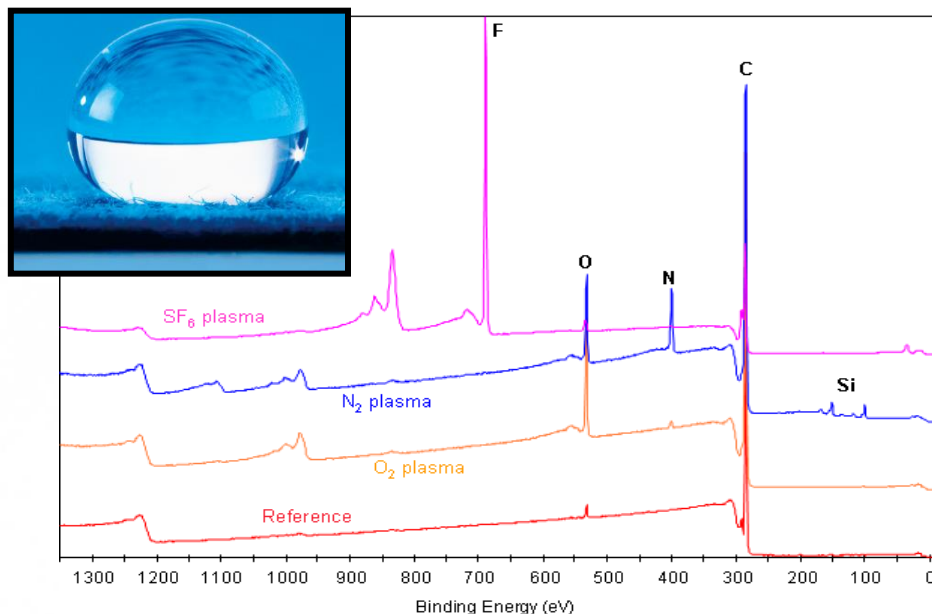
- N、B表现出明显的BN化学组成
- 预期之外的氧化Cd信号，以及部分硝酸盐的N信号
- 玻璃主要成分SiO₂的信号，化学态信息符合预期
- 预期之外的微量Ca元素组成，表现出CaO的形式

■ 小结：

- 主要含有B,N元素，接近1:1
- 部分N元素以硝酸盐形式存在
- 其他预期外的微量元素Cd, Ca
- 了解这信息并对比产品的实际性能有助于指导我们改进生产工艺

案例2：等离子表面改性

XPS行业应用



• 问题

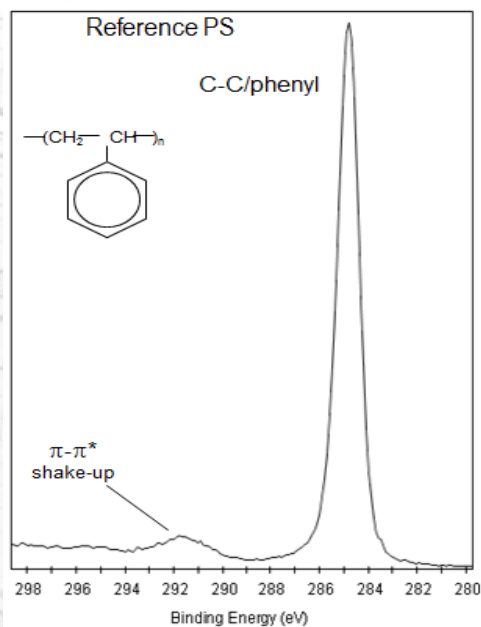
- 最新等离子表面处理手段，可以改进一系列材料的亲水/防水性能
- 比如，PET表面可以通过 SF_6 等离子处理大大增强其疏水性能

• 解决方案

- XPS结合深度剖析可以评估这种聚合物涂层的效果
- 使用角分辨XPS来更彻底地研究等离子改性结果

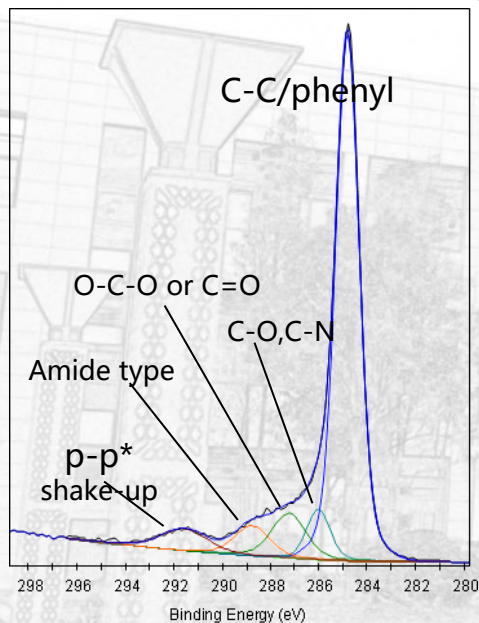
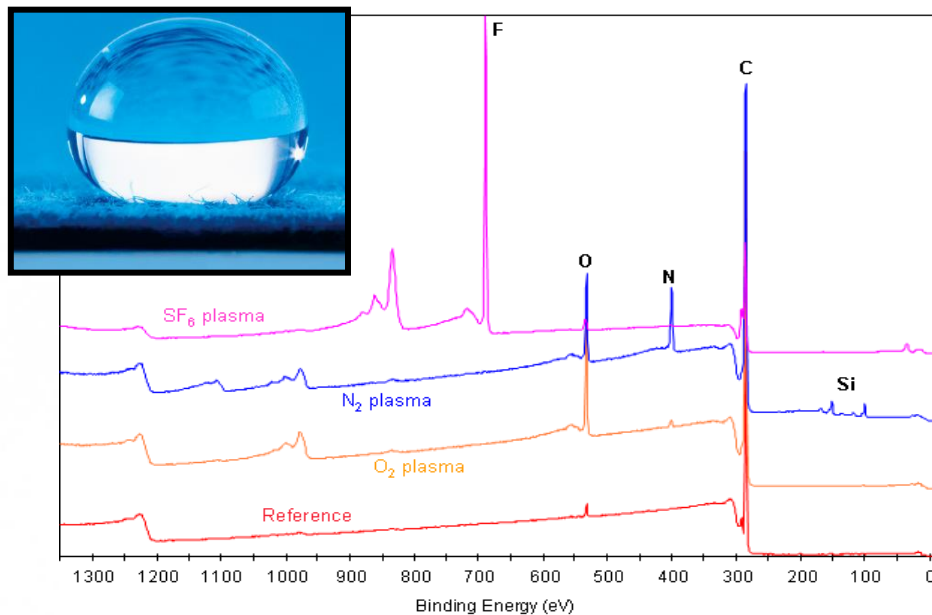
• 小结

- 电子束产生的等离子体可以改性聚苯乙烯的表面而不会粗化表面
- N_2/O_2 等离子体改性将一些亲水性的N和O功能团注入了样品中
- SF_6 改性产生了一些 CF_x 功能团
- 改性只局域在最表面的2.5 nm – 3 nm



案例2：等离子表面改性

XPS行业应用



• 问题

- 最新等离子表面处理手段，可以改进一系列材料的亲水/防水性能
- 比如，PET表面可以通过SF6等离子处理大大增强其疏水性能

• 解决方案

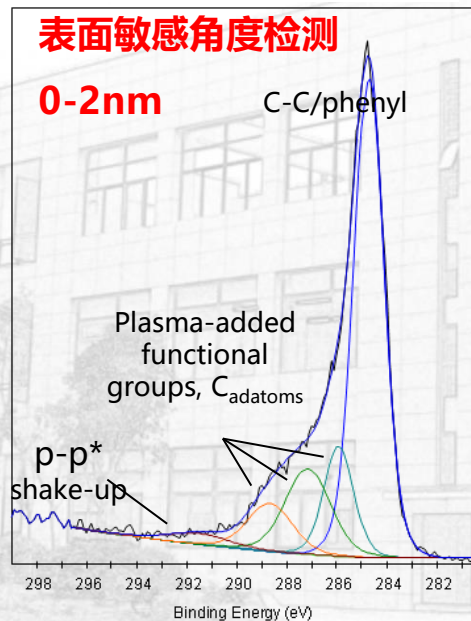
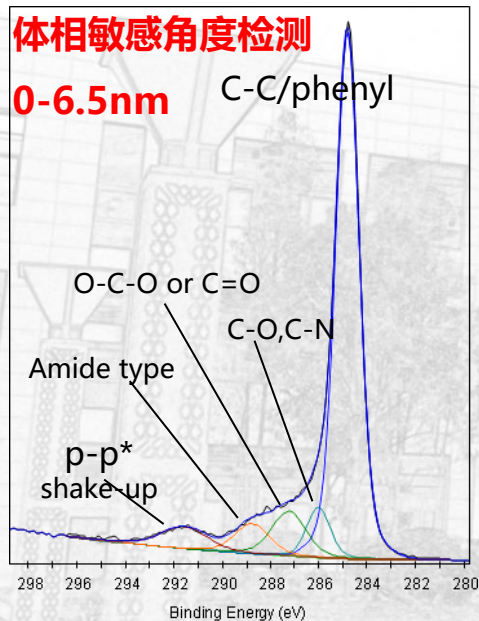
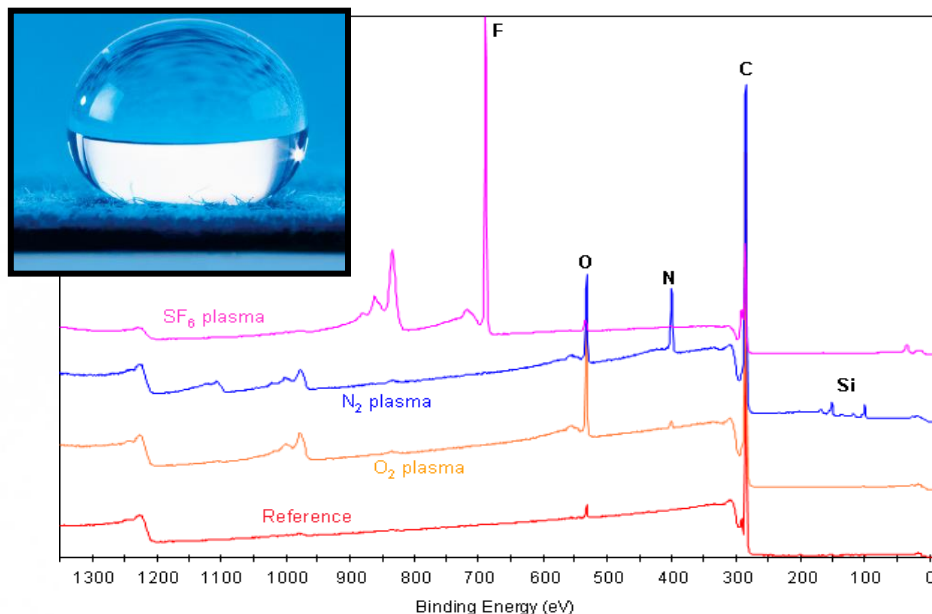
- XPS结合深度剖析可以评估这种聚合物涂层的效果
- 使用角分辨XPS来更彻底地研究等离子改性结果

• 小结

- 电子束产生的等离子体可以改性聚苯乙烯的表面而不会粗化表面
- N₂/O₂ 等离子体改性将一些亲水性的N和O功能团注入了样品中
- SF6改性产生了一些 CF_x 功能团
- 改性只局域在最表面的2.5 nm – 3 nm

案例2：等离子表面改性

XPS行业应用



• 问题

- 等离子表面处理手段，可以改进一系列材料的亲水/防水性能
- 比如，PET表面可以通过SF6等离子处理大大增强其疏水性能

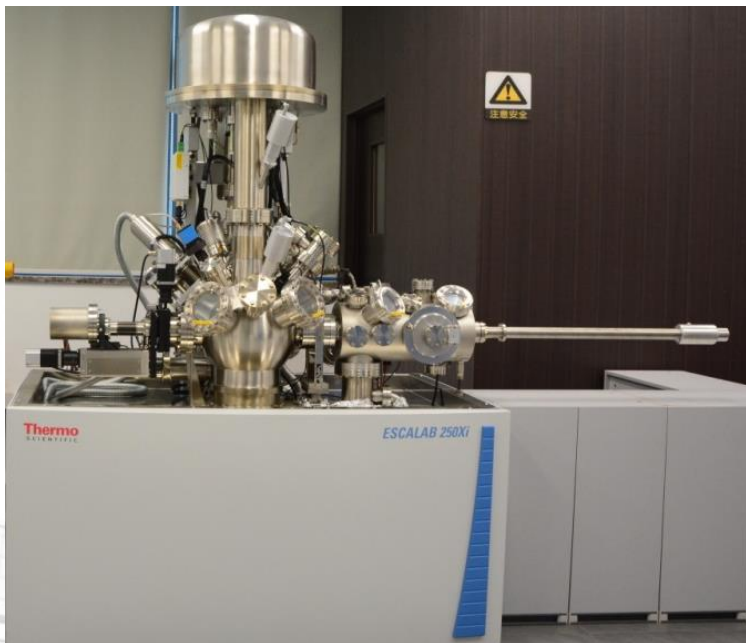
• 解决方案

- XPS结合深度剖析可以评估这种聚合物涂层的效果
- 使用角分辨XPS来更彻底地研究等离子改性结果

• 小结

- 电子束产生的等离子体可以改性聚苯乙烯的表面而不会粗化表面
- N₂/O₂ 等离子体改性将一些亲水性的N和O功能团注入了样品中
- SF6改性产生了一些 CF_x 功能团
- 改性只局域在最表面的2.5 nm – 3 nm

表面化学分析技术小结



ESCALAB 250Xi

■ 光电子能谱系统用于先进材料和器件的表面分析表征

- 实验直接
 - 样品无需特殊制备
 - 易操作
 - 导电和不导电样品分析
 - 不接触以及无污染
- 极其表面敏感性
 - 表征超薄涂层和薄膜，其他技术手段很难实现
 - 表面化学态分析（一般<5纳米的深度分析）
- 元素和化学键信息
 - 元素识别和定量分析
 - 金属氧化程度分析
 - 污染鉴别
- 薄膜和超薄薄膜分析
 - 氧化/涂层无损分析<5纳米
 - 溅射剖析厚度信息和掩盖的界面层



群名称:分析中心XPS用户群2
群 号:729553856

分析中心XPS用户群2

举报

聊天 相册 文件 活动 设置



共66个文件 (已使用289MB/10GB)



文件	更新时间	过期时间	大小	上传者	下载次数	
 APS+操作.ZIP	2018-09-07	永久	21.2MB	APS孙...	239次	
 Advantage软件安装.exe	2018-11-01	永久	186MB	XPS孙...	278次	
 重庆大学分析测试中心...	2019-01-10	永久	21KB	XPS孙...	22次	
 分析测试中心2018-20...	2019-01-14	永久	37KB	周楷	33次	
 Advantage 破解软件 ...	2019-03-04	永久	298B	止损	134次	
 共聚焦及bet培训讲座...	2019-03-29	永久	432KB	周楷	14次	
 QQ图片20190329160...	2019-04-02	永久	276KB	周楷	11次	