



Accelerating **Innovation** & Enhancing Productivity

XPS 数据分析及应用介绍

孙文武

5/11/2019

目录

1 XPS原理介绍及XPS作用

2 XPS数据分析及注意事项

3 XPS应用介绍



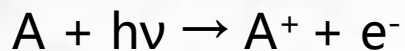
1. XPS原理介绍



● XPS原理介绍

1. XPS原理介绍

根据爱因斯坦光电效应，具有一定能量的入射X 射线照射到原子内层引起了原子A的光化电离即：



按照能量守恒原则有：

$$E(A) + h\nu = E(A^+) + E(e^-)$$

由于电子的能量可以以其动能形式表达，有：

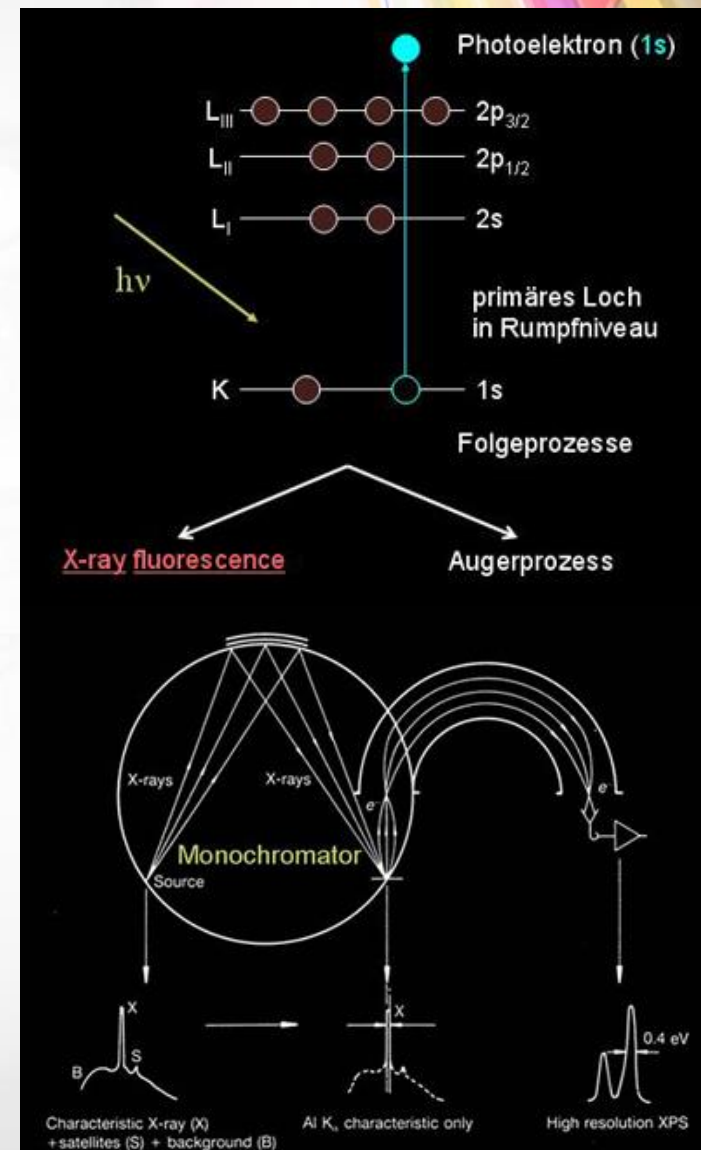
$$E_K = E(e^-)$$

因此：

$$\begin{aligned} E_K &= h\nu - (E(A^+) - E(A)) \\ &= h\nu - E_B \end{aligned}$$

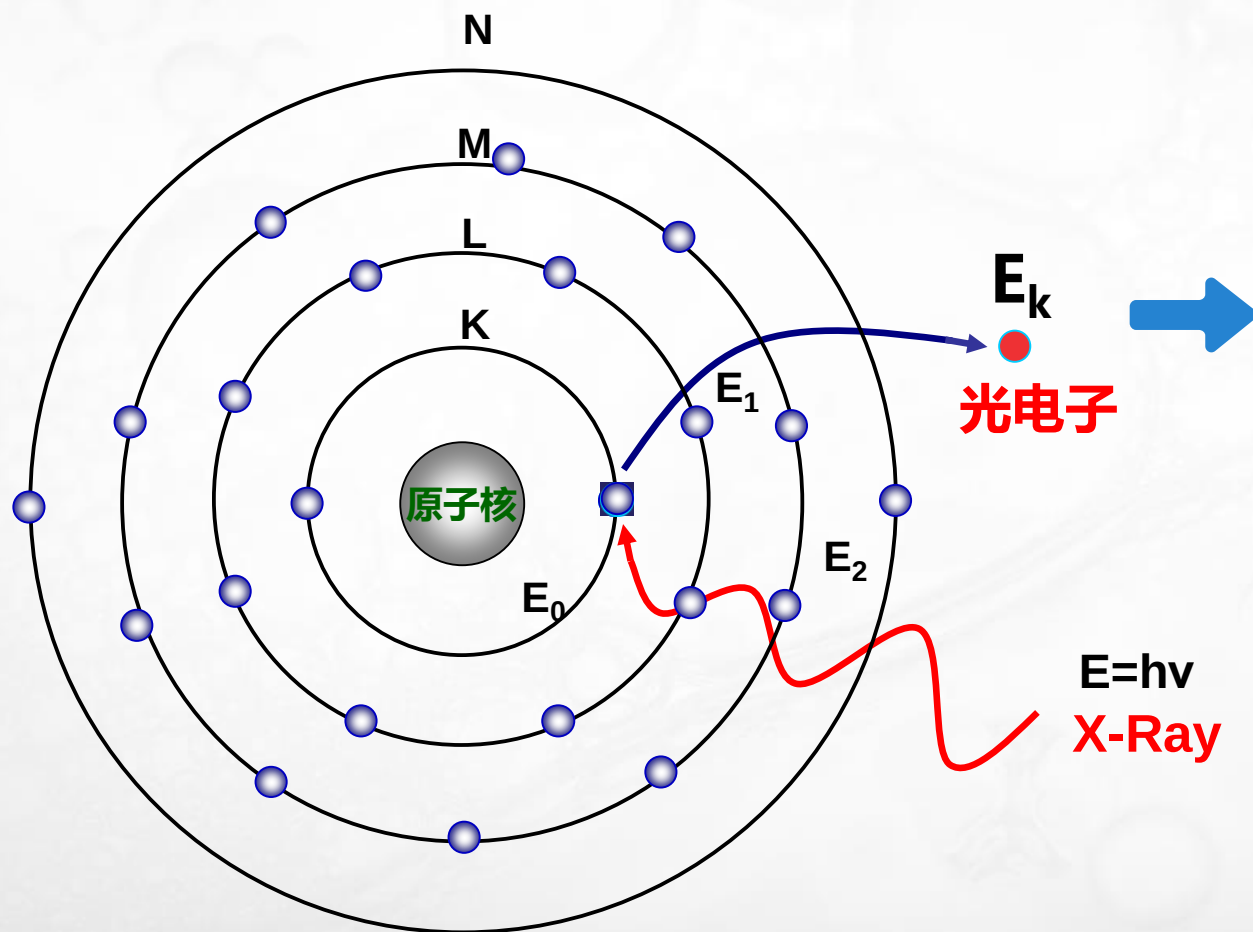
E_B 是电子轨道结合能

带有不同 E_K 光电子可通过电子分析器进行区分并计数，得到 E_B 与对应的电子数量的谱图



1. XPS原理介绍

XPS原理

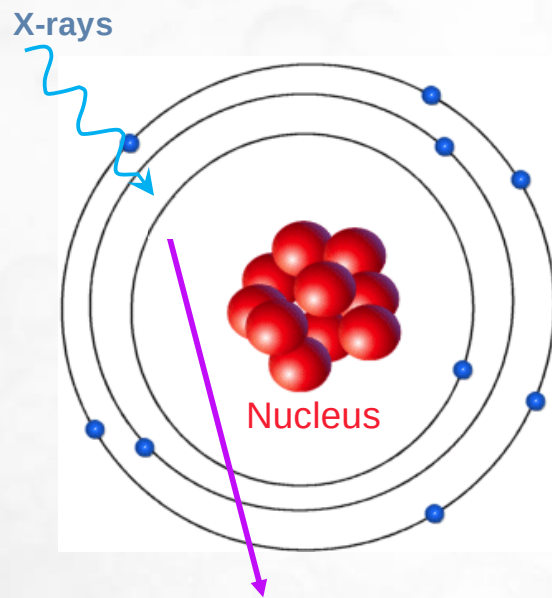


$$E_0 - E_2 = E_B \text{ (结合能)} = h\nu - E_k$$

不同元素的 E_B 不同，具有指纹特性

XPS表面分析技术可以提供什么信息?

表面原子



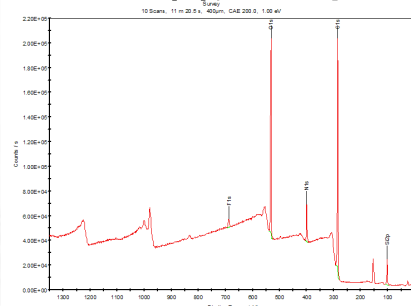
光电效应激发电子

$$BE = h\nu - KE$$

电子结合能信息告诉我们:

有哪些元素

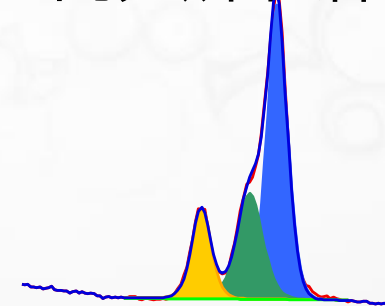
全谱宽扫



元素鉴别和定量

电子轨道信息

高分辨窄谱



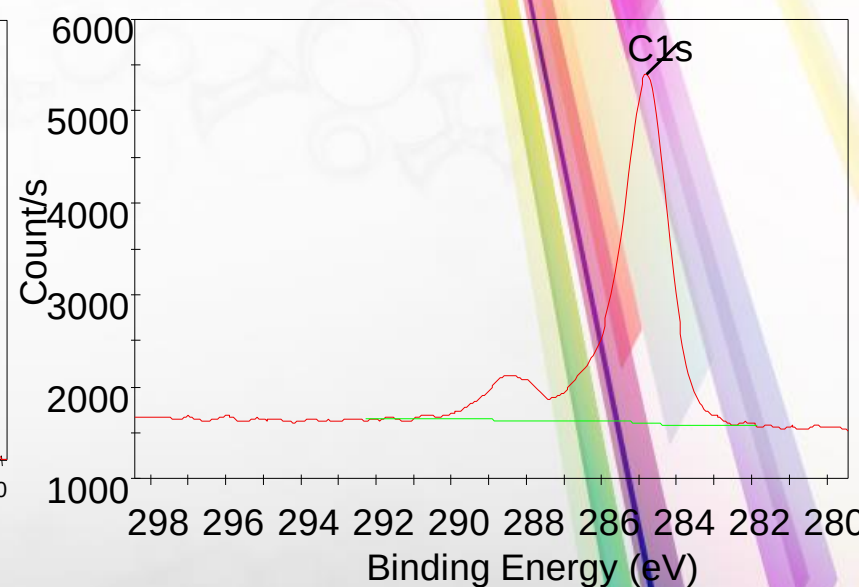
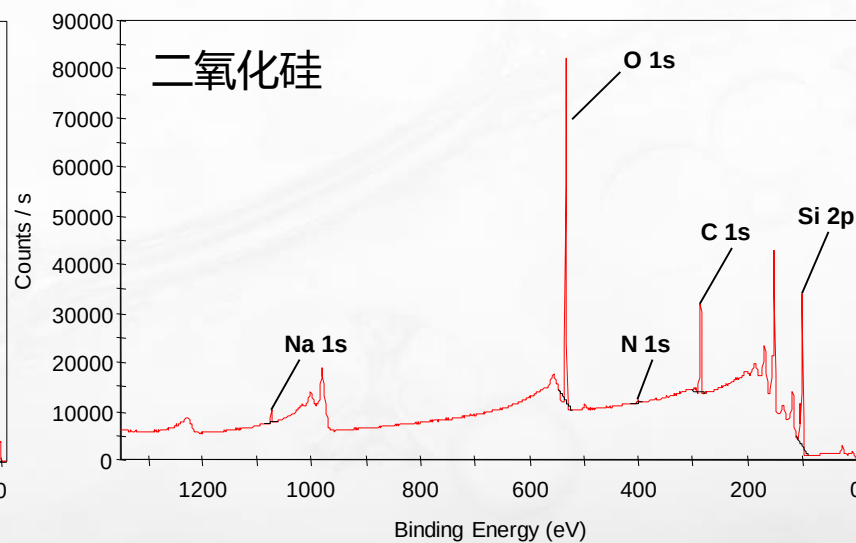
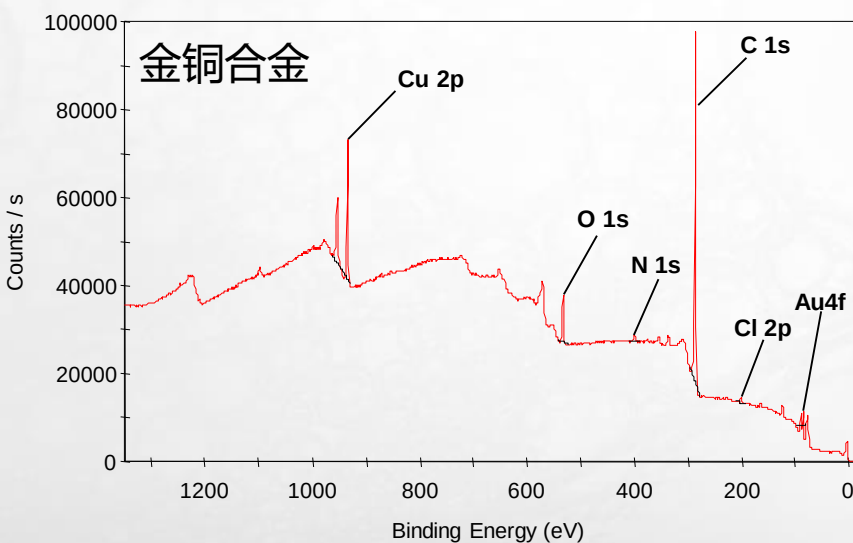
元素化学态鉴别和定量

1. XPS原理介绍

XPS作用

元素定性、定量分析

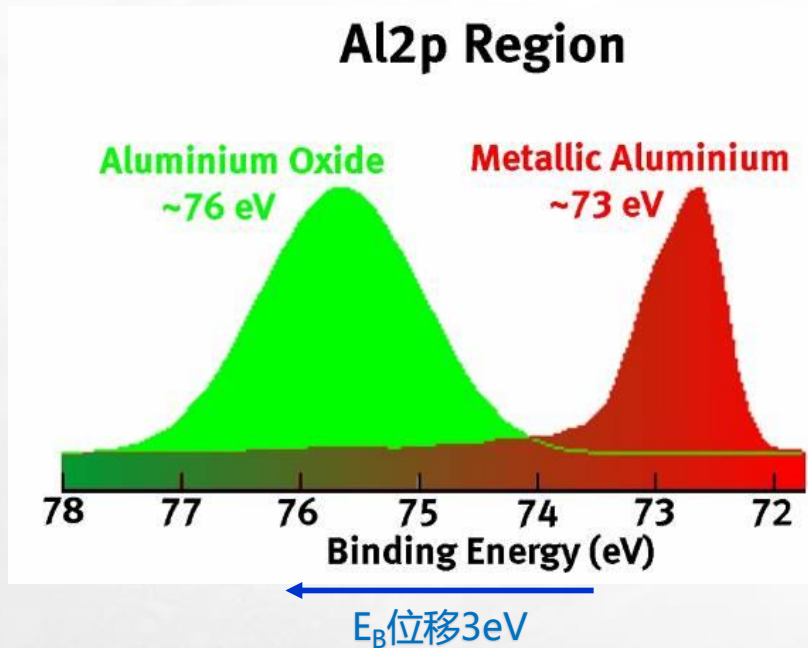
- 根据元素**结合能信息**，每个元素产生的谱峰在XPS谱图中被定性反映出来
- 通过进一步计算这些元素最强峰的谱峰面积，可以得到元素的相对定量信息



1. XPS原理介绍

元素价态信息

如果同一个元素处在不同的价态，由于其所处的化学环境不同（有效库仑相互作用变化），会使相同能级的结合能有差别，这种差别被我们称为化学位移（chemical shift）。通过结合能的差异，我们能得到元素的价态信息

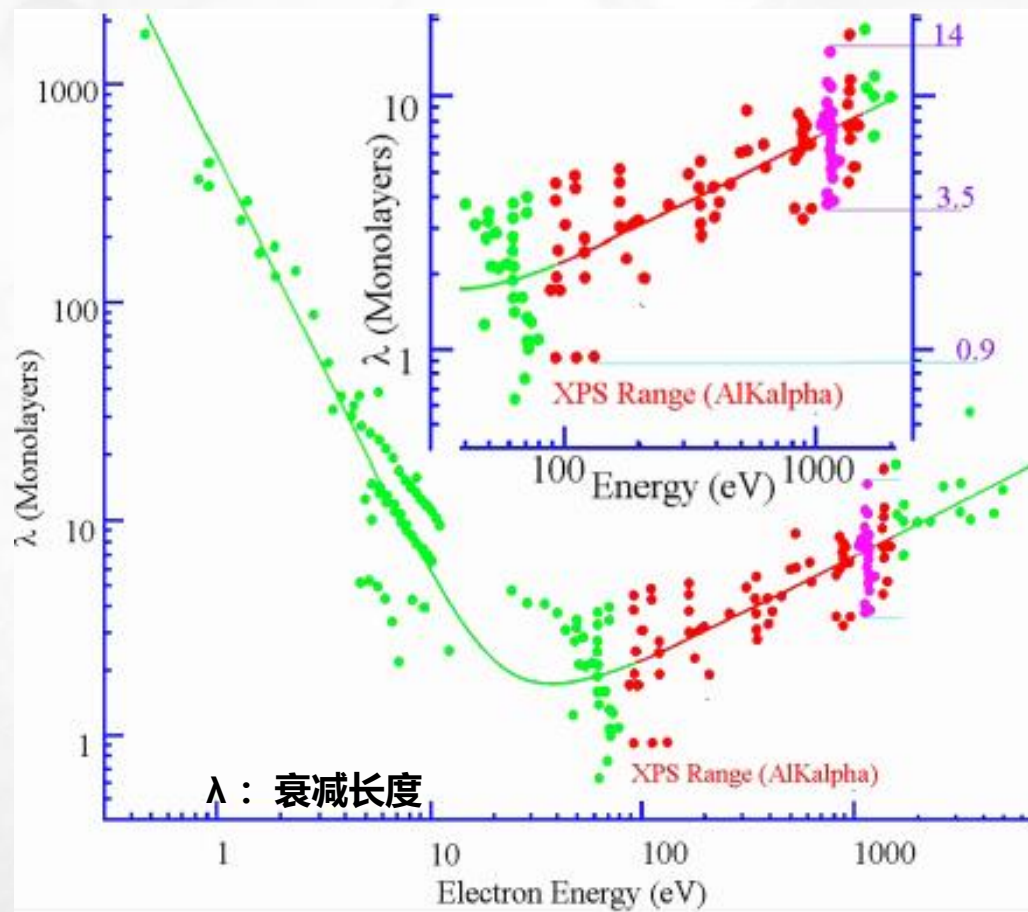


Chemical state	Binding energy Al2p / eV
Al metal	72.6
Aluminosilicate	74.4
Al oxide (alumina)	74.6
Al oxide on Al foil	75.6

价态升高（失去电子），结合能增加；价态降低（得到电子），结合能减少

1. XPS原理介绍

小结:



- XPS是一种**表面敏感**的技术手段
~30个原子层, 表面~10nm深度
- XPS可以识别**材料表面**的元素组成
- XPS可以得到每种元素的价态信息

X射线光电子能谱法是一种对材料表面约10nm范围内的元素及元素价态进行定性、定量的方法

2. XPS数据分析及其注意事项

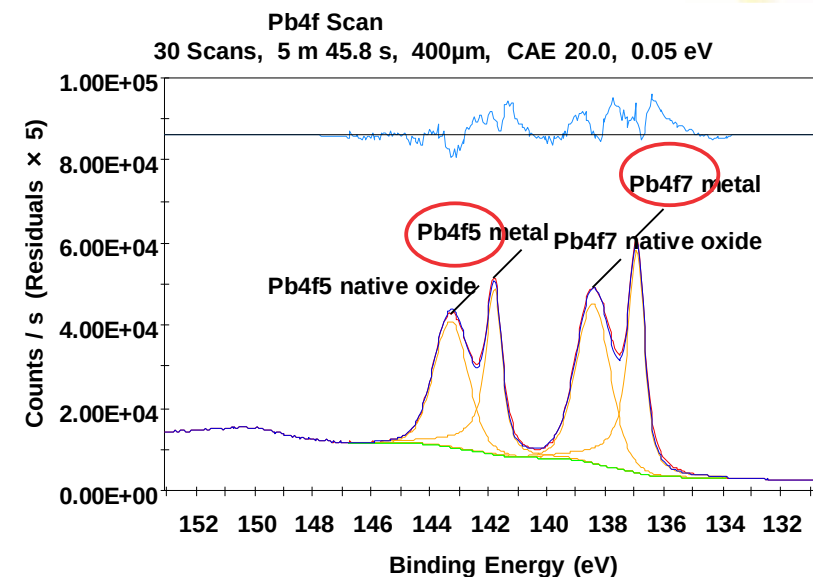
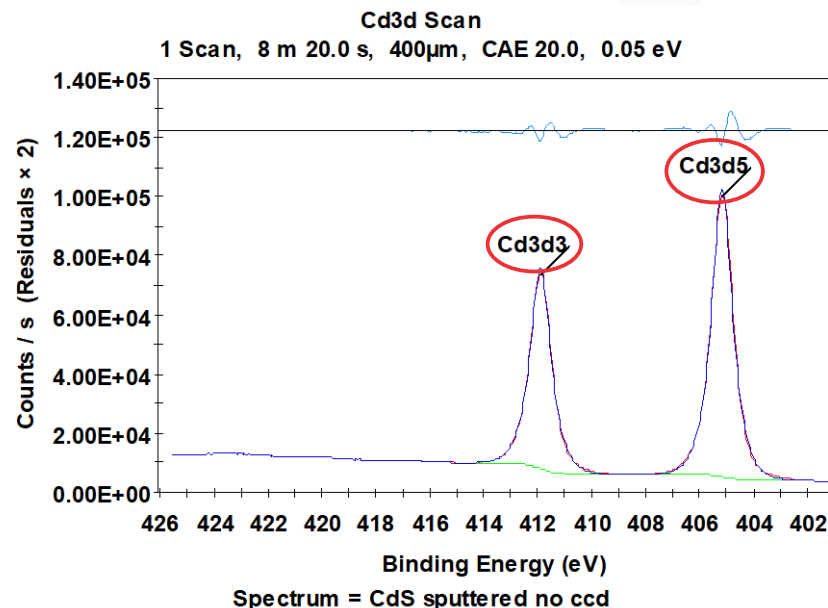
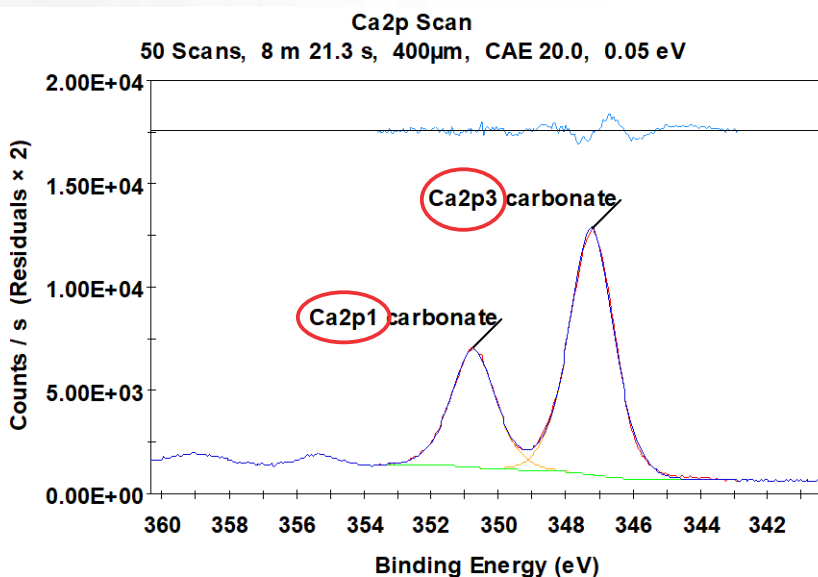
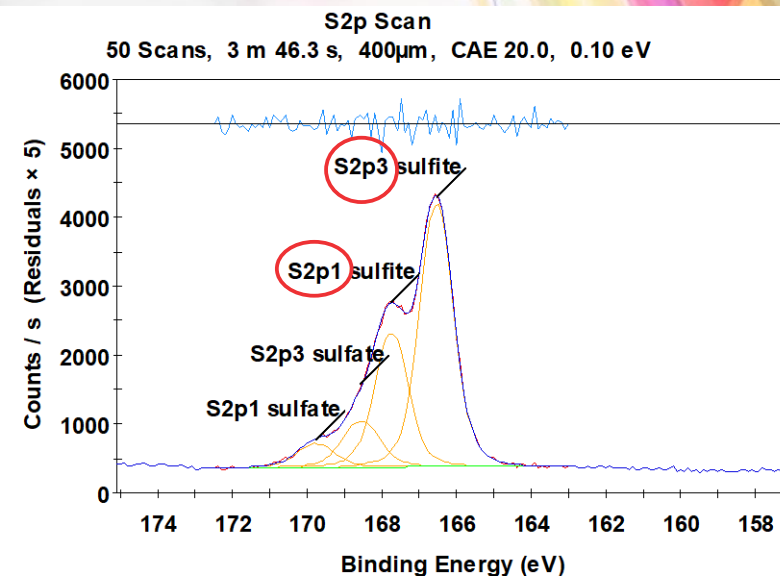
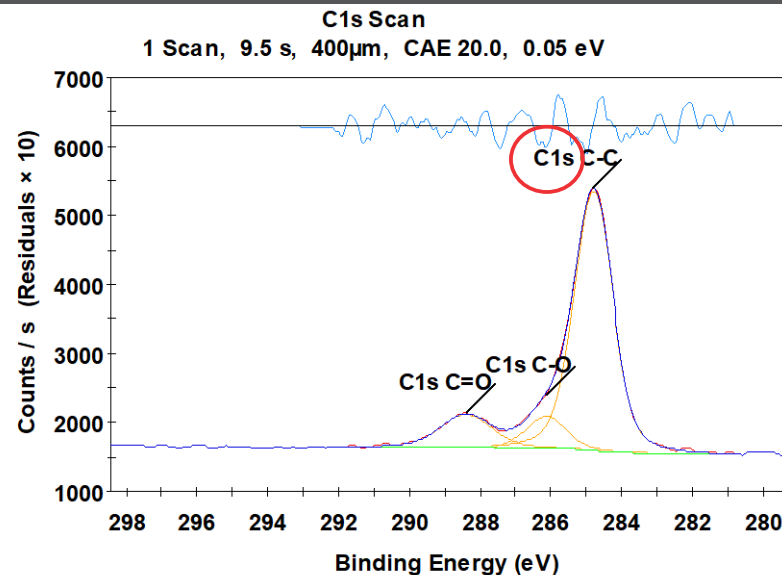
● XPS数据分析及其注意事项

2. XPS数据分析及其注意事项

- 2.1
XPS测试图谱基本知识简介
- 2.2
XPS数据分析介绍
- 2.3
XPS数据分析案例介绍

2.1 XPS测试谱图基本知识介绍

XPS谱图的标识



2.1 XPS测试谱图基本知识介绍

XPS谱图的标识

XPS谱峰标识用的是谱学家或者化学家标识：借助量子数来描述光电子，通常用 nl_j 来标识。

- n 为主量子数，取整数1、2、3等；
- l 为角量子数，通常用一个字母表示；
- $j = |l + s|$, s 为自旋量子数，为 $\pm 1/2$

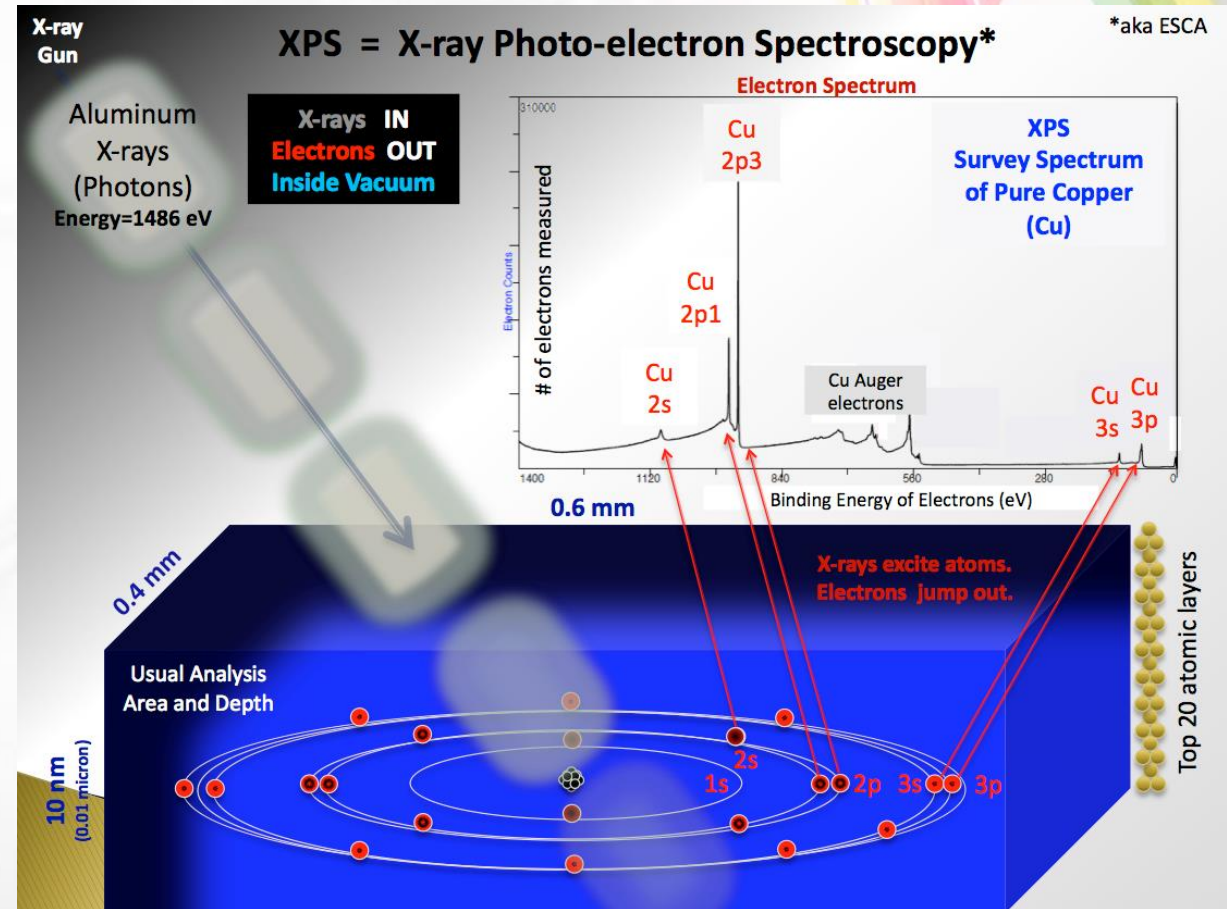
l	通常标识符
0	s
1	p
2	d
3	f

n	l	m_s	J	谱学家标识符号
1	0(s)	$\pm 1/2$	1/2	$1s_{1/2}$ (简称1s)
2	0(s)	$\pm 1/2$	1/2	$2s_{1/2}$ (简称2s)
2	1(p)	-1/2	1/2	$2p_{1/2}$ (简称2p1)
2	1(p)	1/2	3/2	$2p_{3/2}$ (简称2p3)
3	0(s)	$\pm 1/2$	1/2	$3s_{1/2}$ (简称3s)
3	1(p)	-1/2	1/2	$3p_{1/2}$ (简称3p1)
3	1(p)	1/2	3/2	$3p_{3/2}$ (简称3p3)
3	2(d)	-1/2	3/2	$3d_{3/2}$ (简称3d3)
3	2(d)	1/2	5/2	$3d_{5/2}$ (简称3d5)
.....				

2.1 XPS测试谱图基本知识介绍

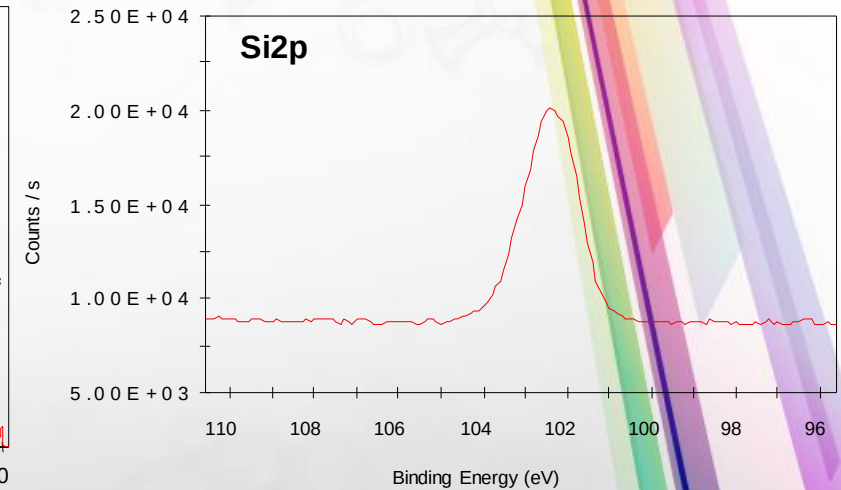
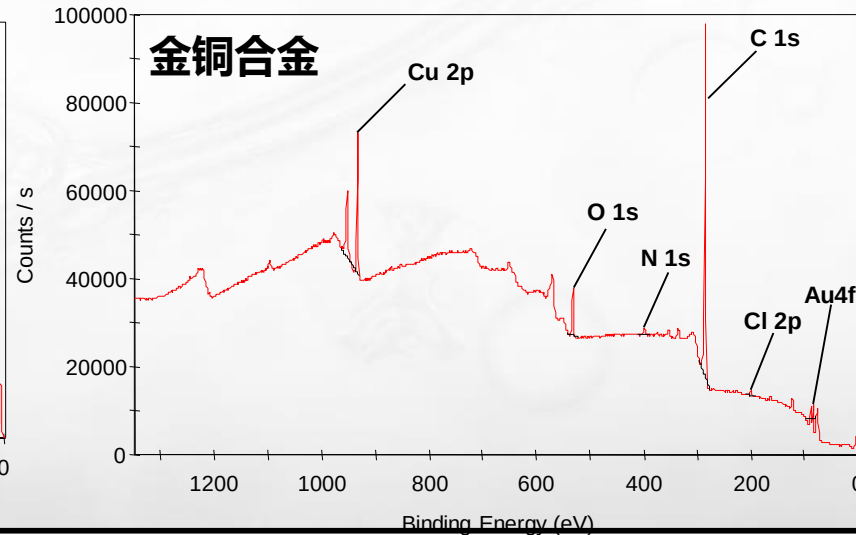
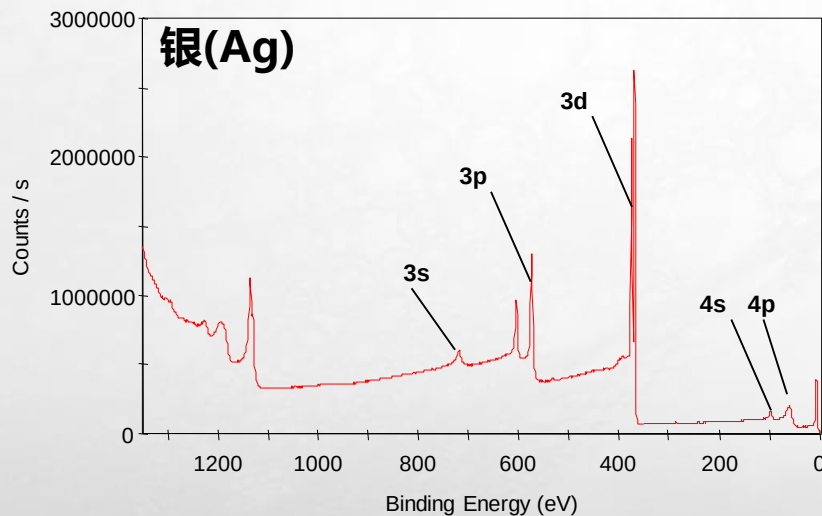
XPS谱峰的主要结构

- 在XPS图谱中常见的几种谱峰结构
 - 基于XPS理论 ($E_B = h\nu - KE$) 的主峰结构——总是存在和被观测
 - 依赖于物理和化学性质的伴峰结构



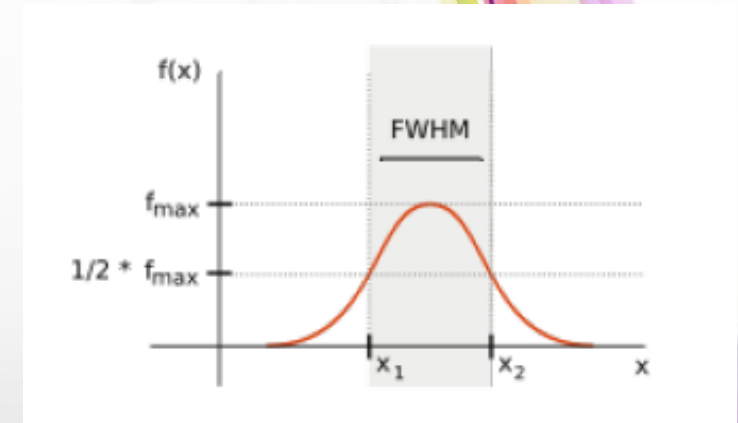
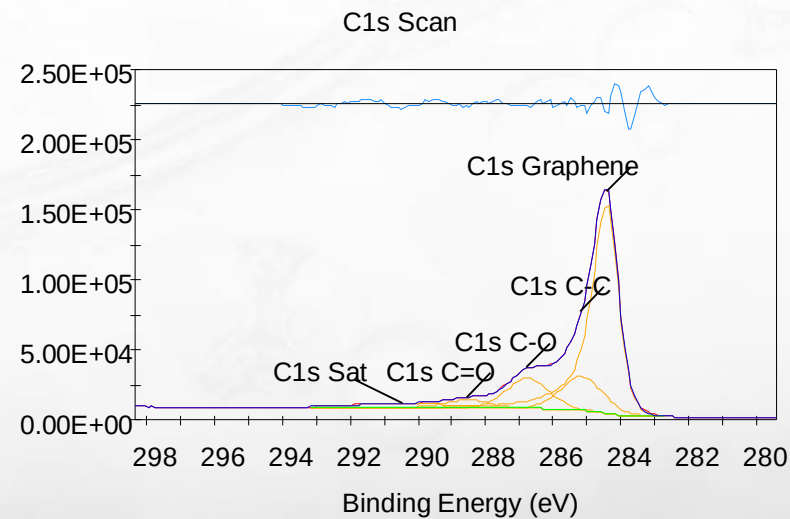
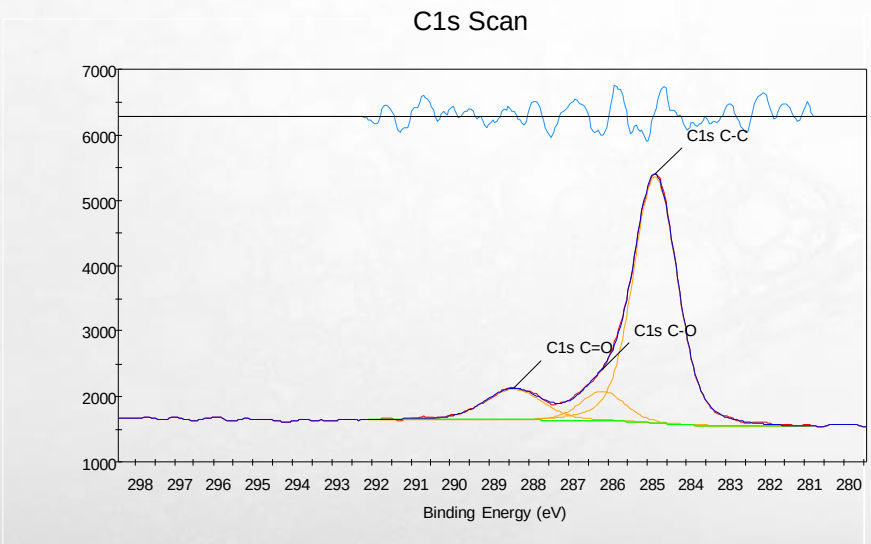
XPS谱峰主要结构

- 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原子多个轨道的光电子，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** ——与表面元素的浓度和原子灵敏度因子成正比
- **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；一般高分辨窄扫图谱拟合建议半高宽范围0.5eV ~ 2.5eV



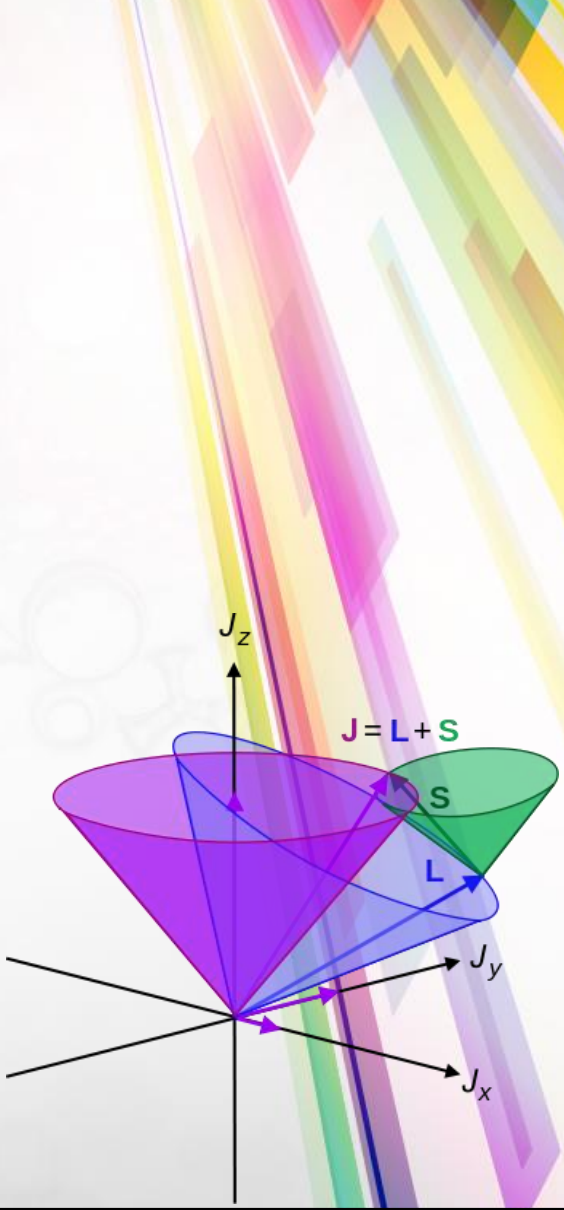
自旋轨道劈裂的主峰

- **自旋-轨道分裂 (SOS)** 是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) 的耦合而分裂成两个峰。总角动量 $j = |l \pm s|$ 。
- 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，两个峰的相对强度依赖于自旋-轨道分裂能级的**简并度**，即为 $2j + 1$

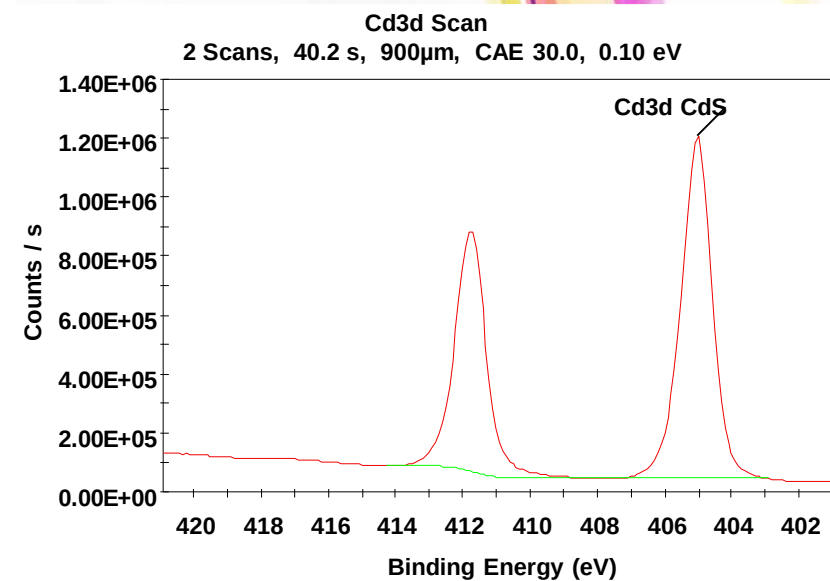
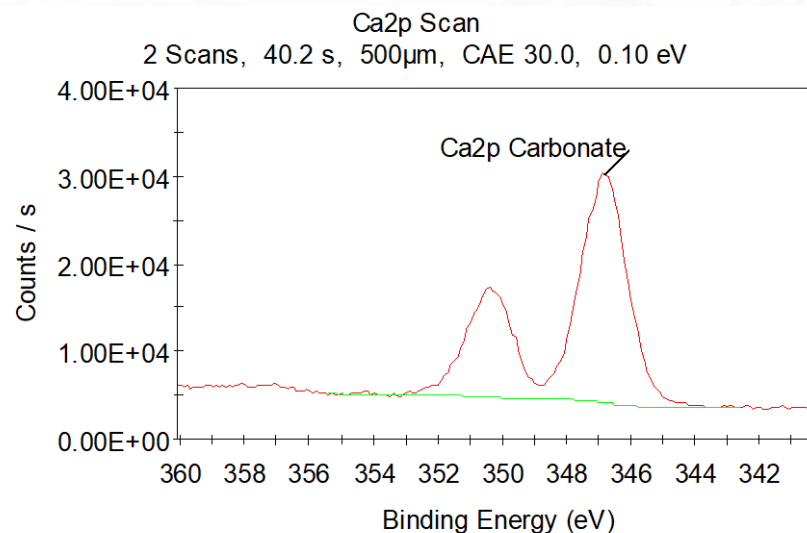
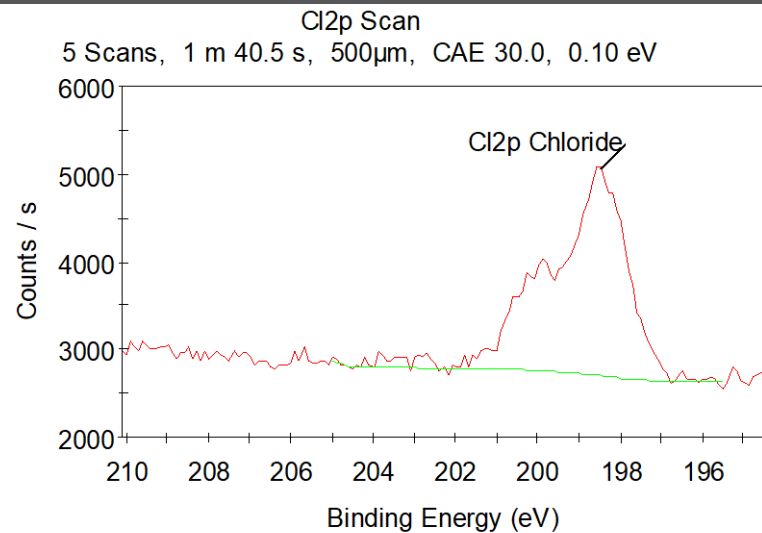
SOS的基本规律

- 对于不同元素，双峰分裂间距随Z（原子序数）增加
- 自旋-轨道分裂的大小随与核的距离增加(核屏蔽增加)而减小
- 随化学态会有变化，如Sc、Ti、V、Cr等元素（主要为第四周期元素）
- 双峰强度比例有如右图关系：

Subshell	<i>j</i> 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

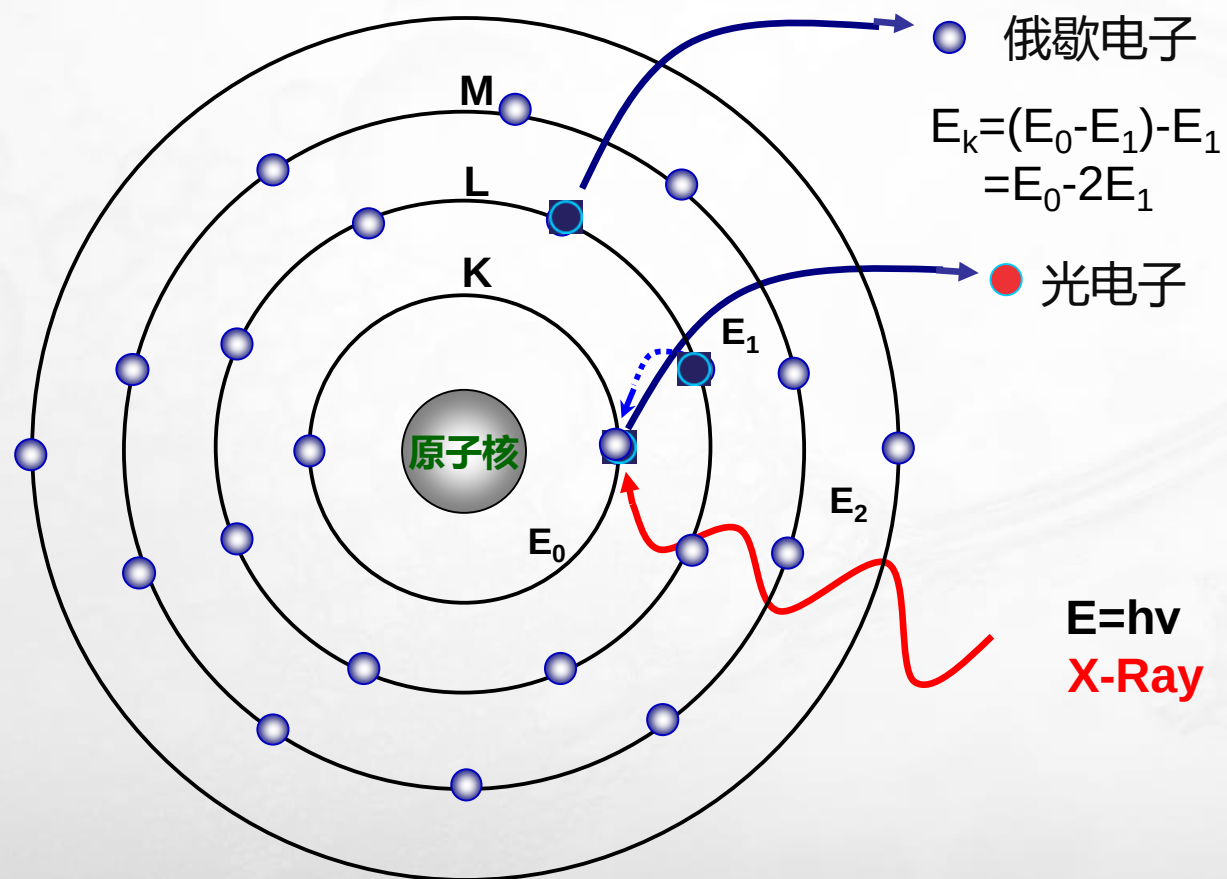


自选轨道劈裂的主峰



XPS的伴随效应-----俄歇过程

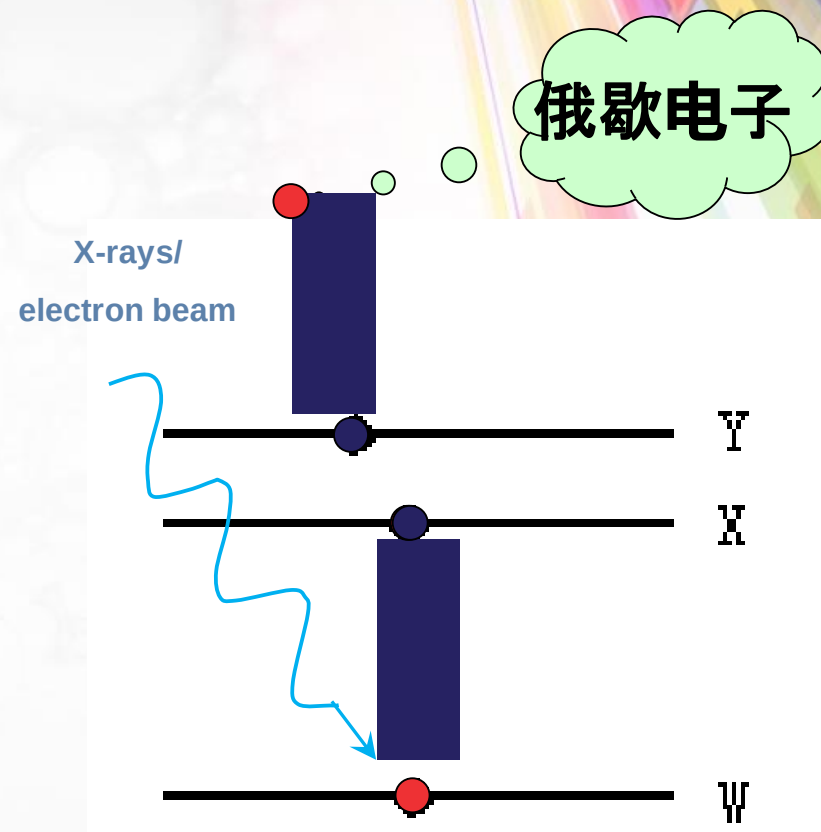
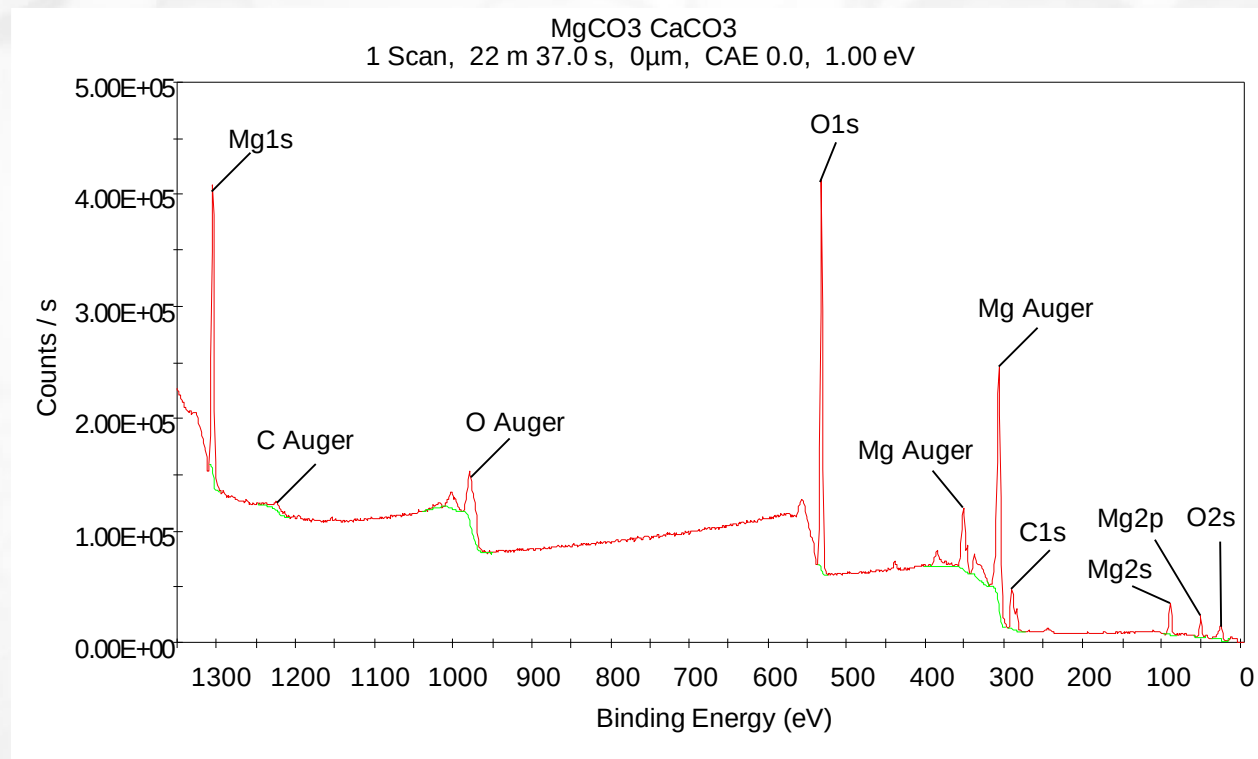
俄歇电子发射过程：入射电子束或X射线使原子内层能级电子电离，外层电子产生无辐射跃迁，发射俄歇电子，电子能谱仪在真空中能探测到此电子。



俄歇电子特征

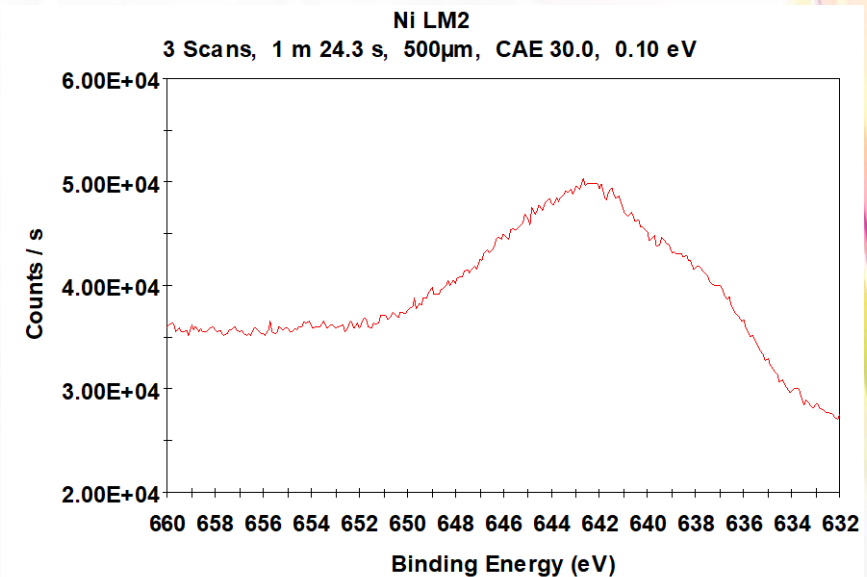
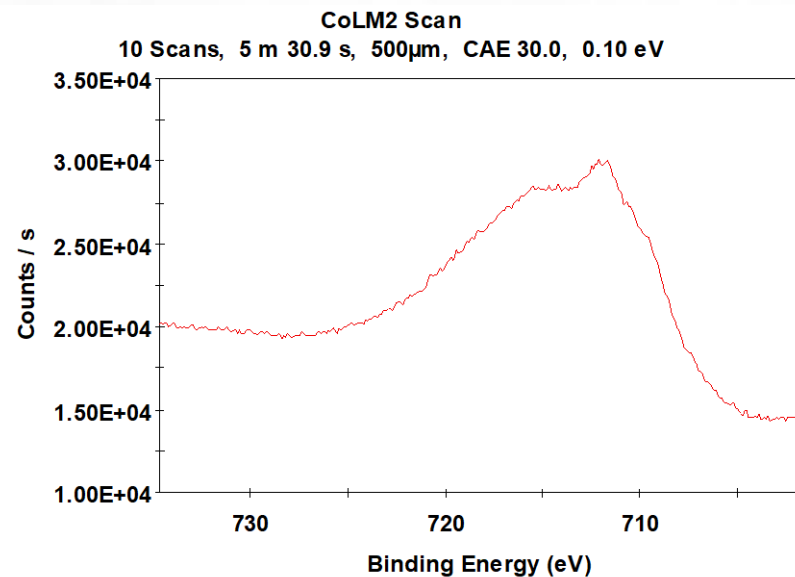
- 光电子和伴随俄歇电子出现在同一点上,即它们同时从一个原子中跳出来的;
- 俄歇电子的能量与入射线的能量无关, 俄歇电子射出的方向与光电子射出的方向无关, 具有较强指纹性, 可用于元素和价态分析;
- 产生俄歇电子的过程中,原子产生两个轨道空位, 其中一个填充原始空位产生的,另一个是由俄歇过程引起的。

XPS的伴随效应-----俄歇过程



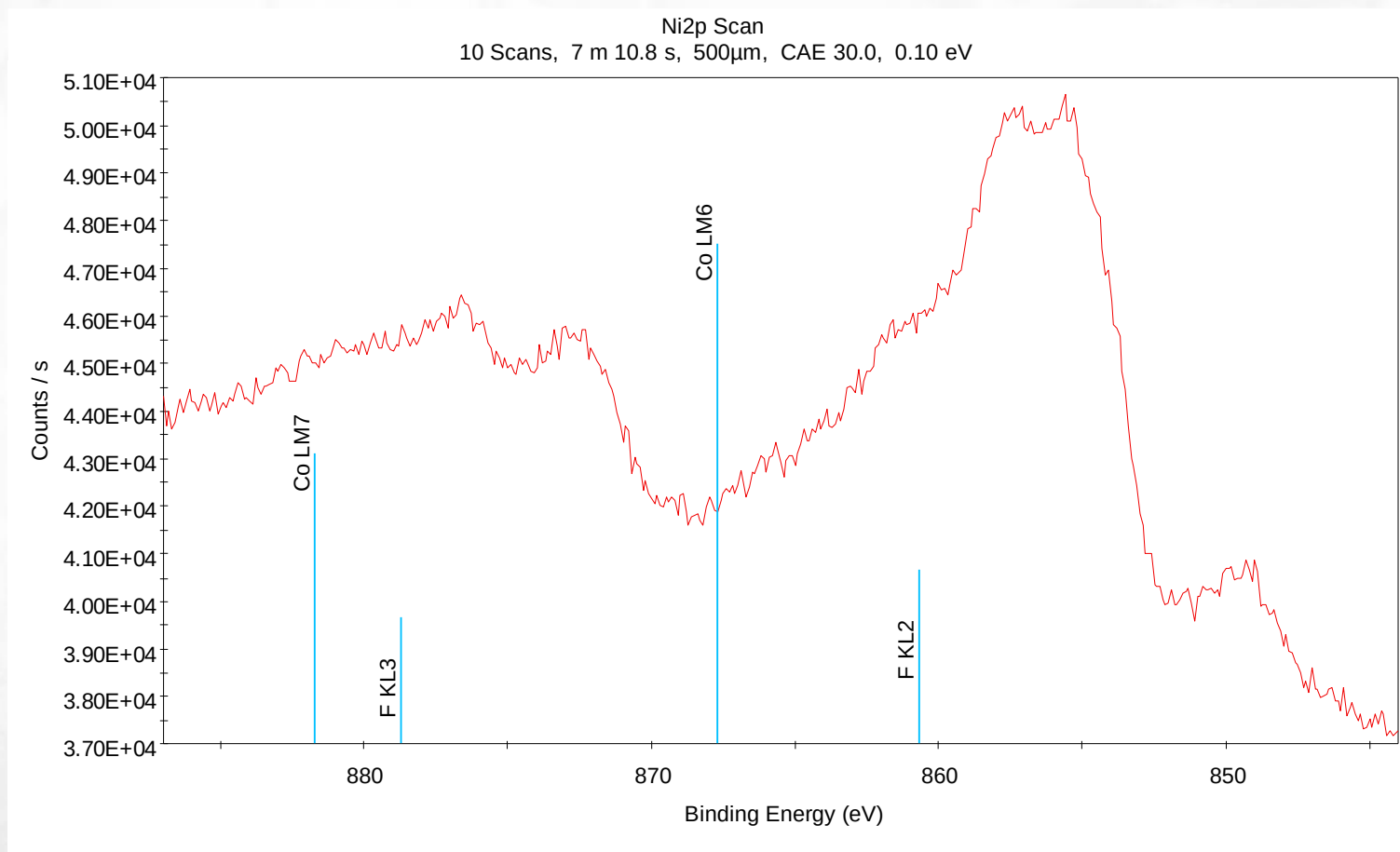
俄歇电子峰多以 谱线群 的形式出现。

总是伴随着 XPS出现，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



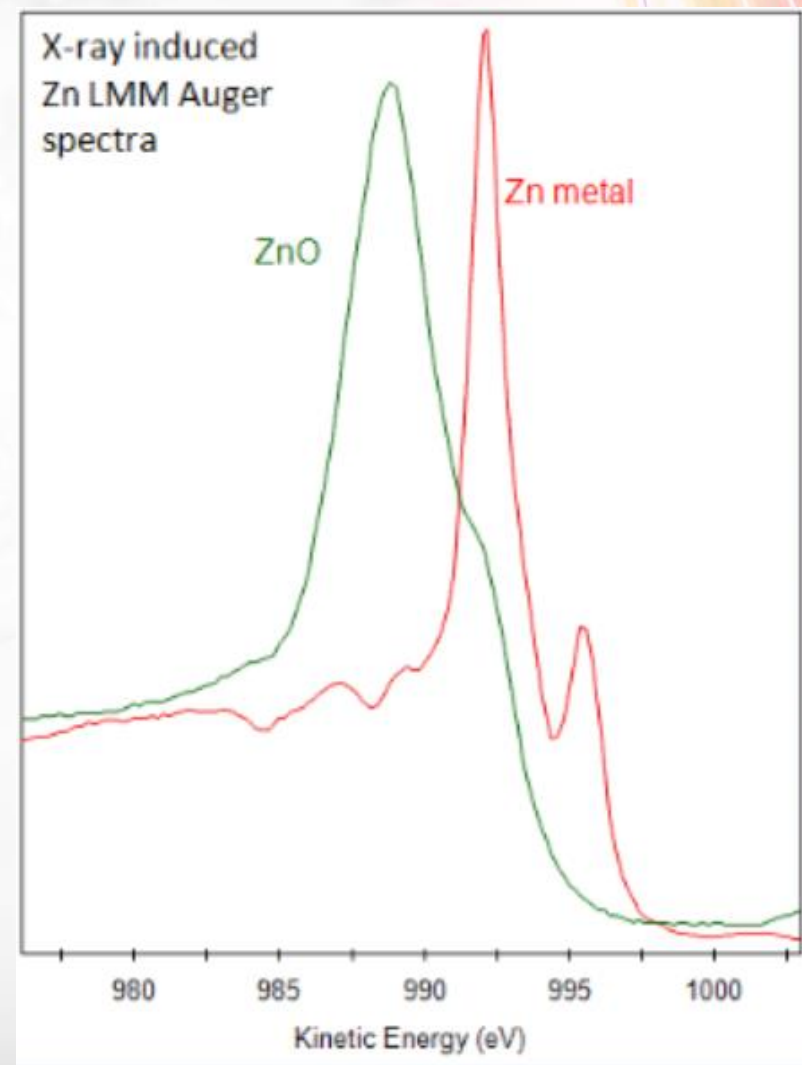
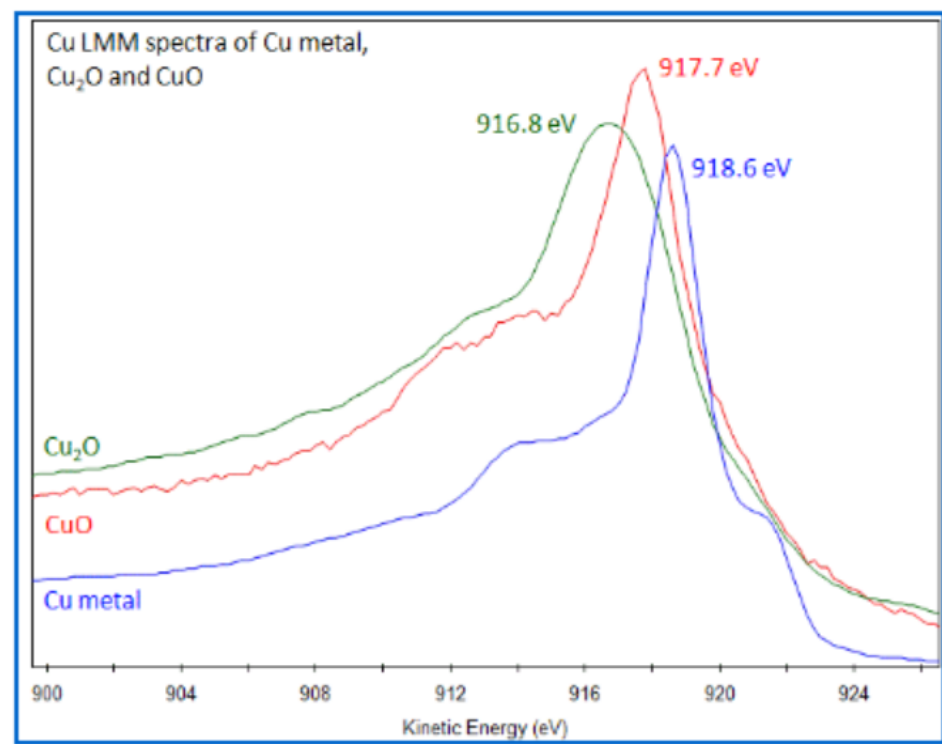
XPS的伴随效应-----俄歇过程

俄歇峰对XPS测试谱图干扰



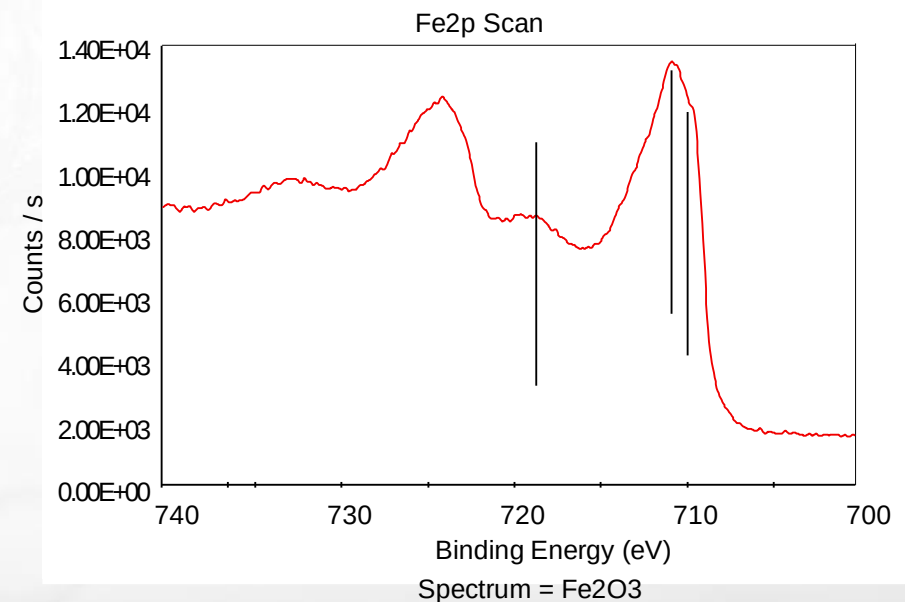
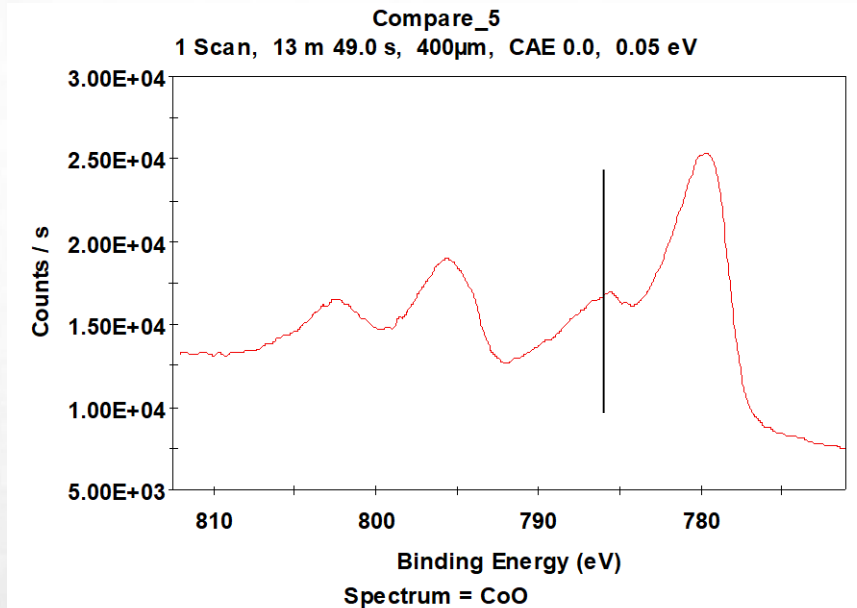
XPS的伴随效应-----俄歇过程

定性作用

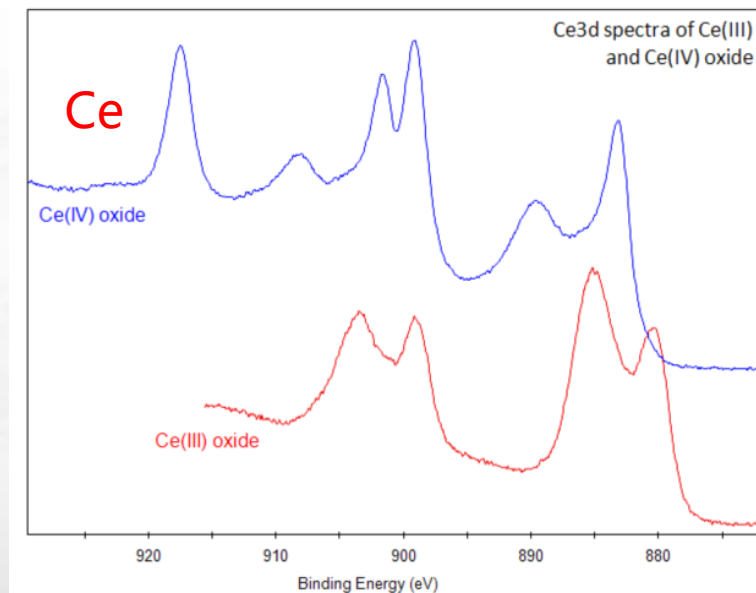
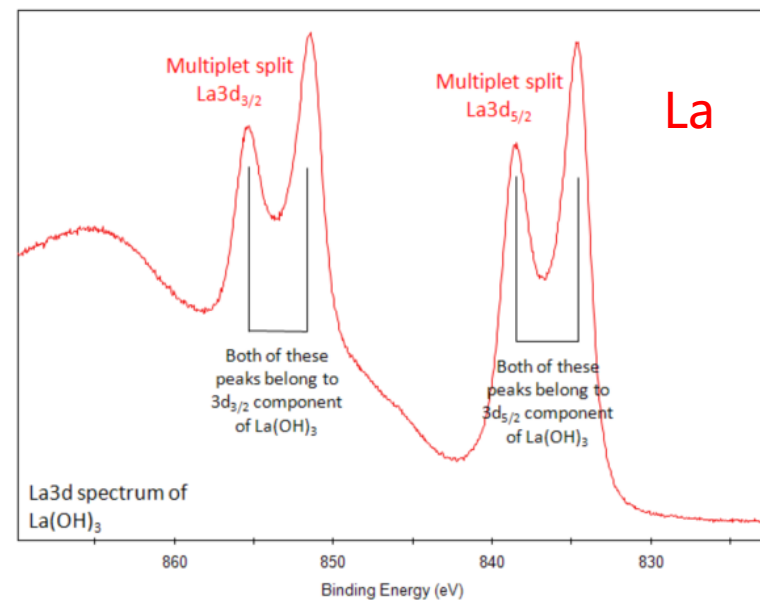
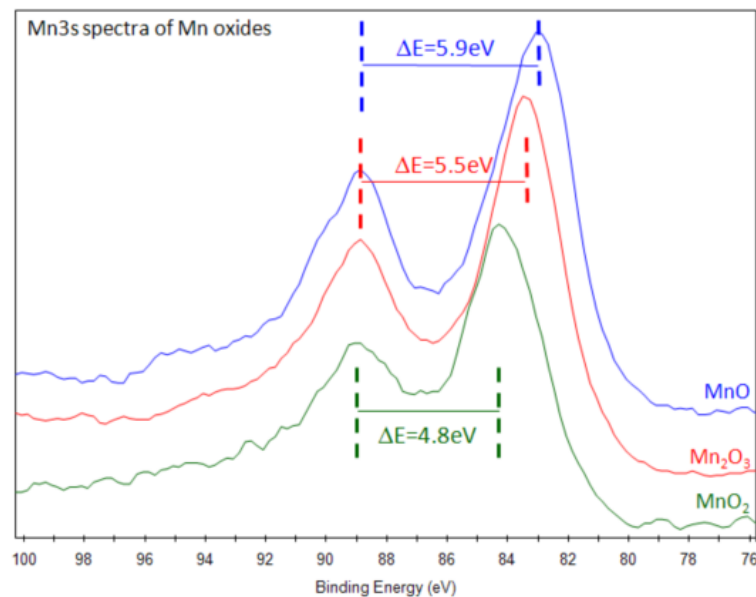
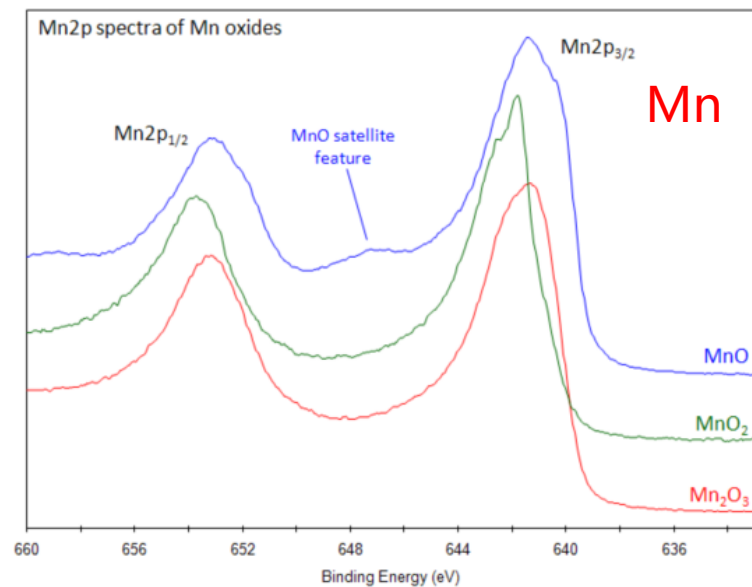


XPS的伴峰结构——终态效应产生伴峰

- 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、 Co、 Ni等

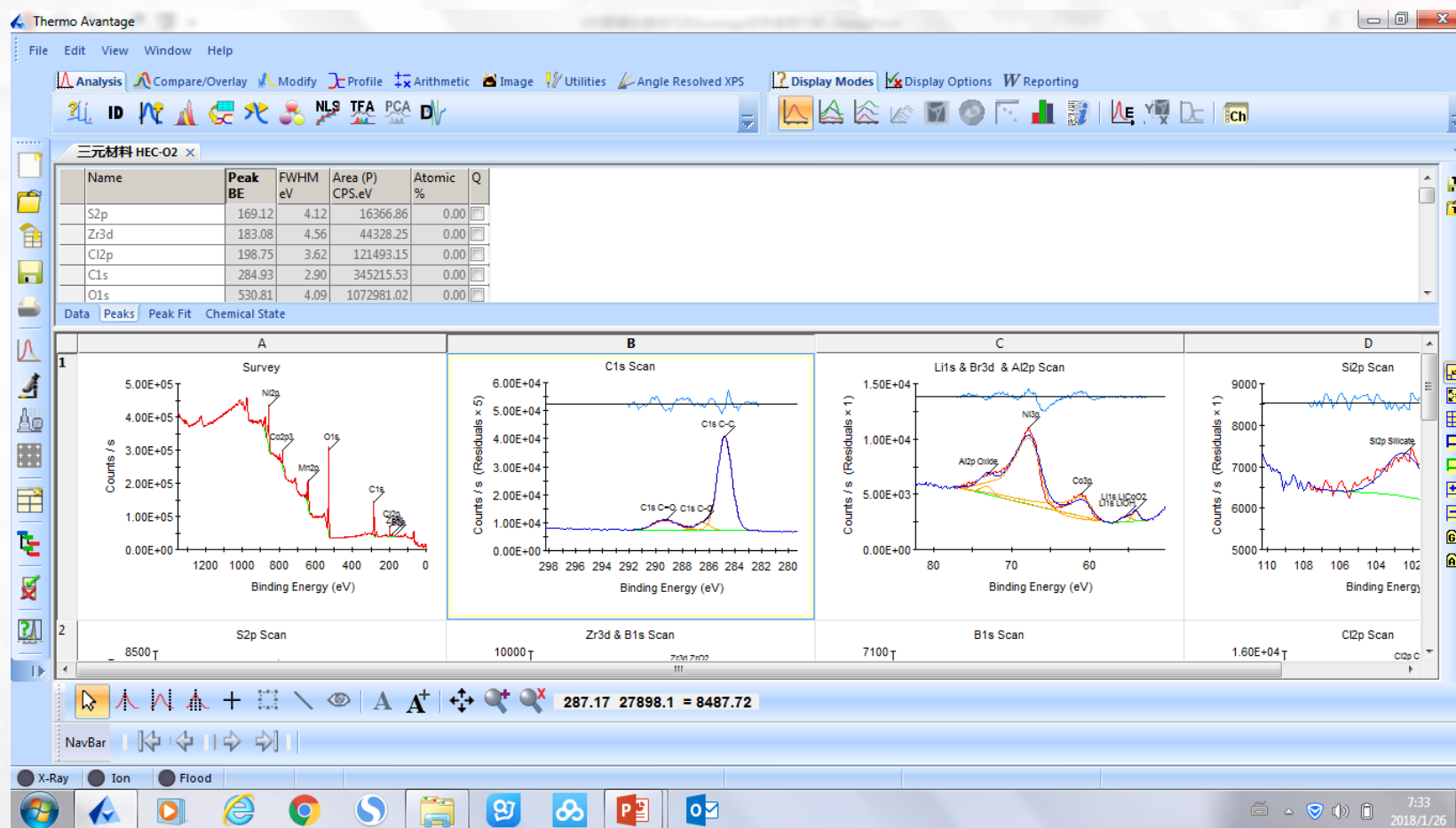


XPS的伴峰结构——终态效应产生伴峰



2.2 XPS数据分析介绍

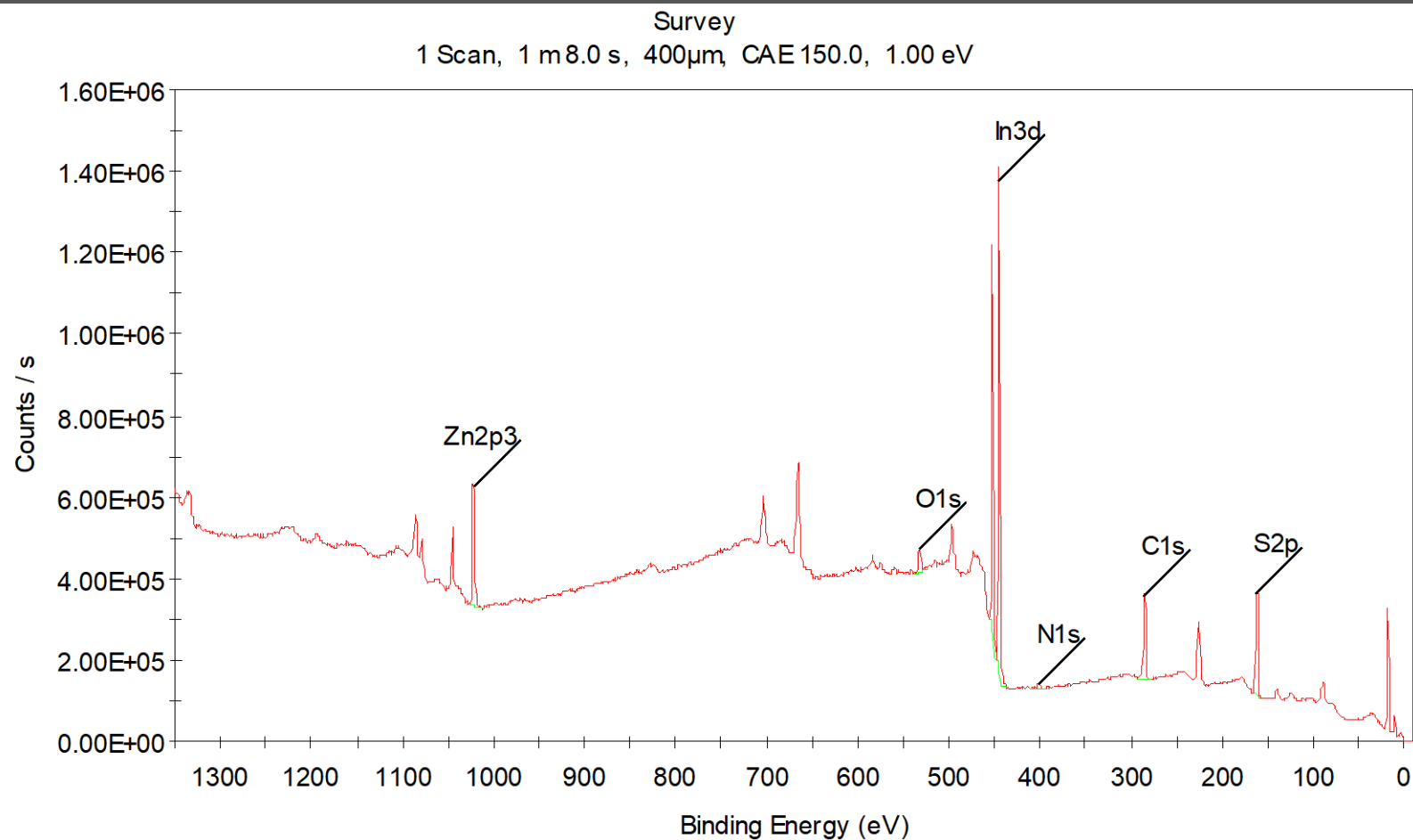
XPS数据处理工具---Avantage软件



➤ Thermo Avantage软件下载地址:

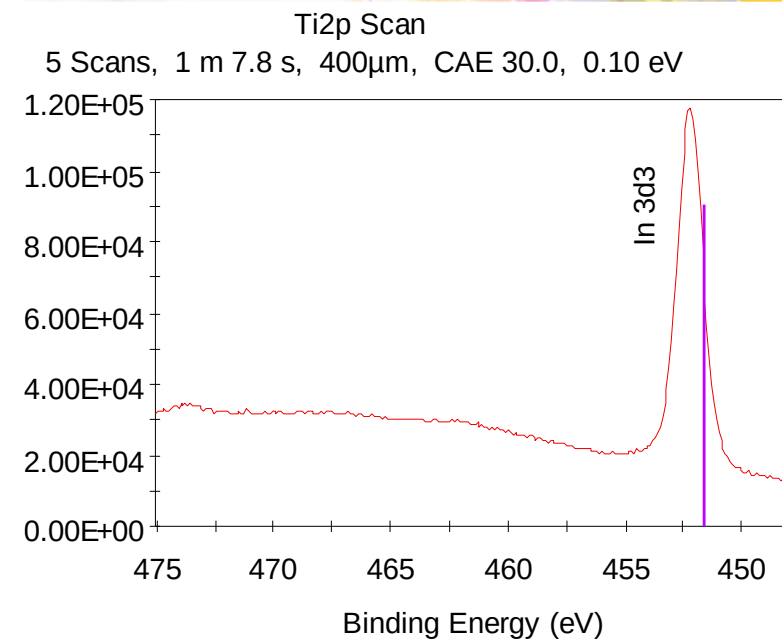
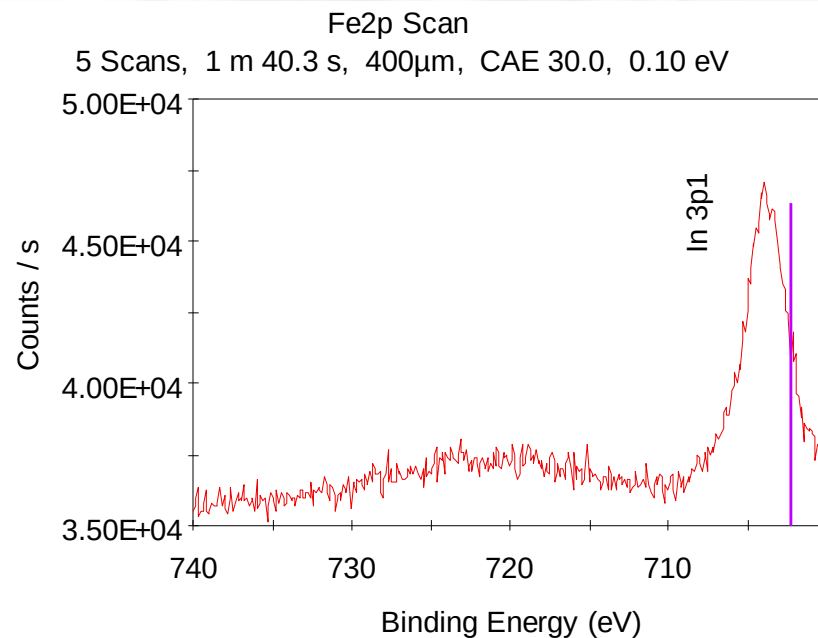
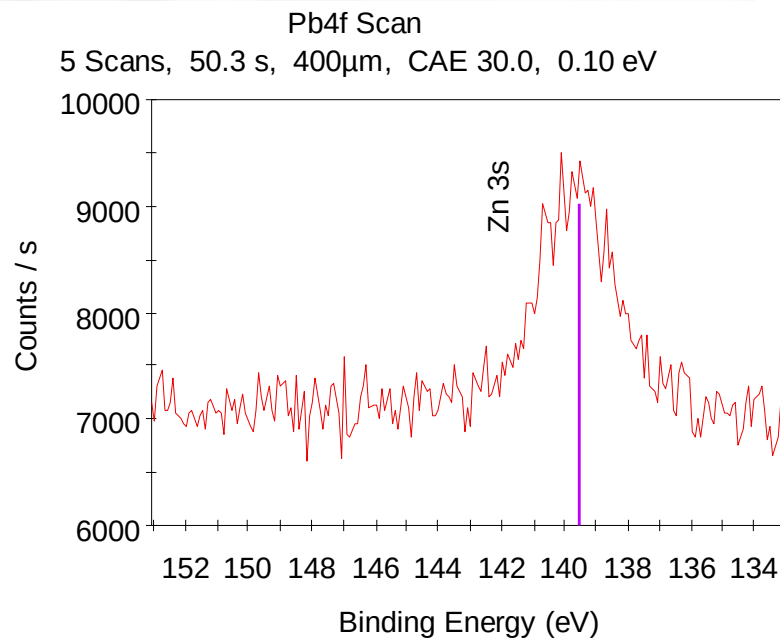
<https://share.weiyun.com/f9e39d90a214d238b3f6e4f17c793a2a>

数据分析介绍-----谱峰干扰判断



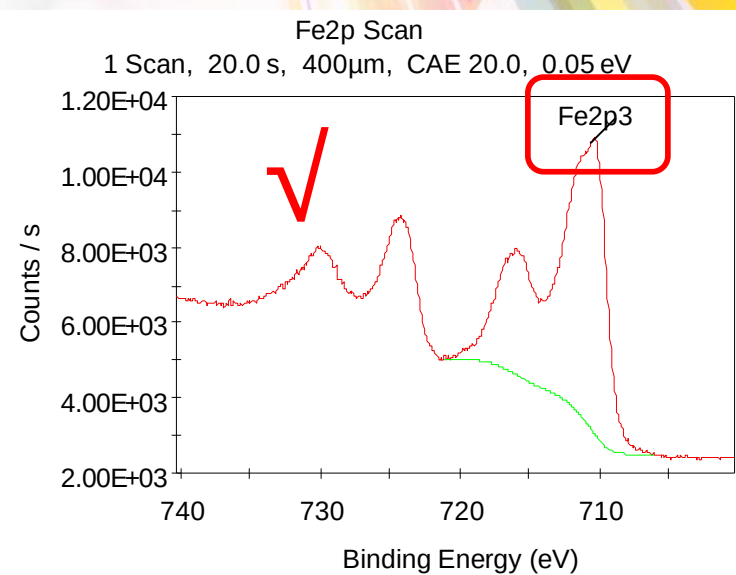
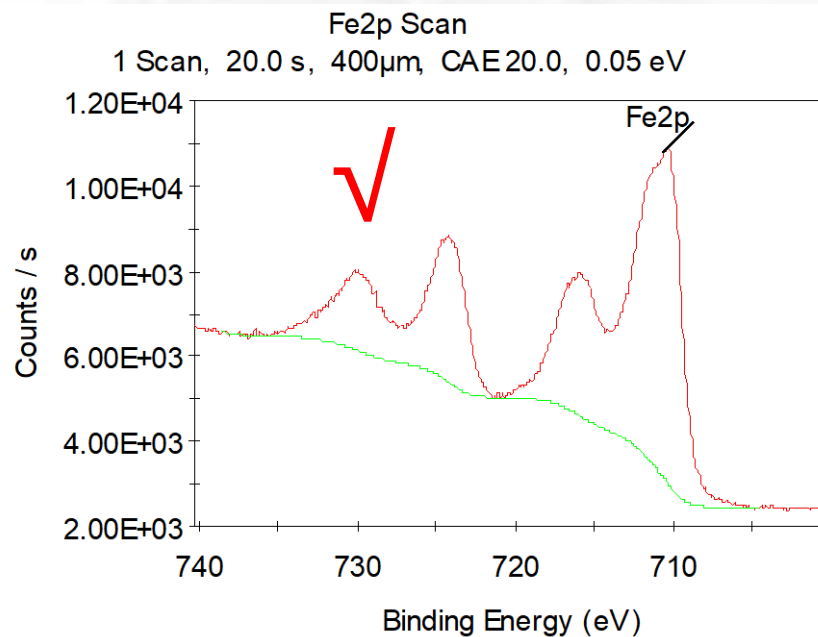
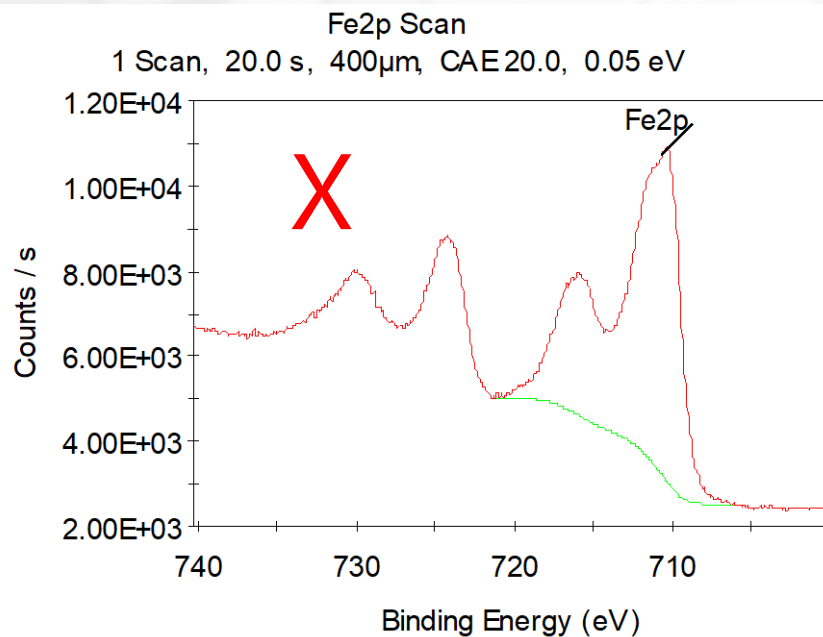
要有谱峰干扰识别意识

注意：并非所有出峰都来源于待测元素-----元素间的谱峰重叠



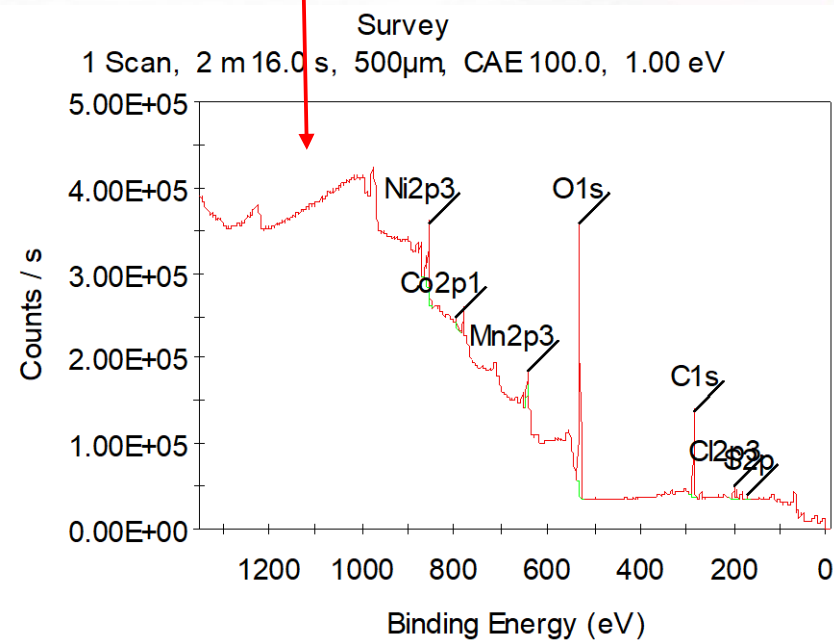
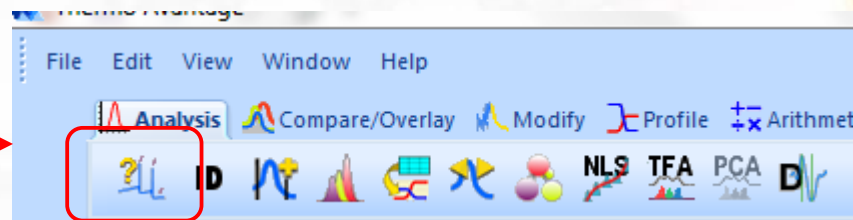
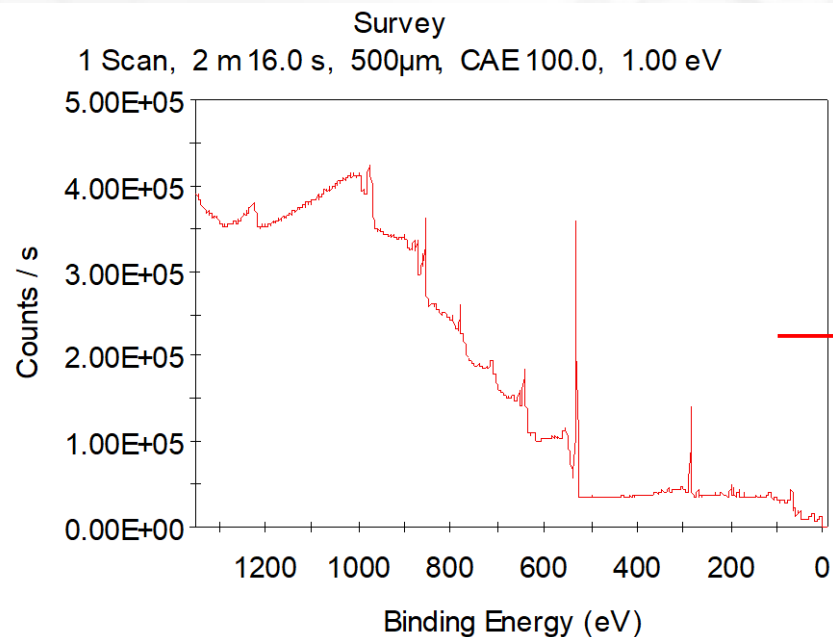
- 这些信号并非依次来源于Zn、Fe、Ti，而是来源于Zn和 In元素

注意：定量范围与谱峰名称相对应



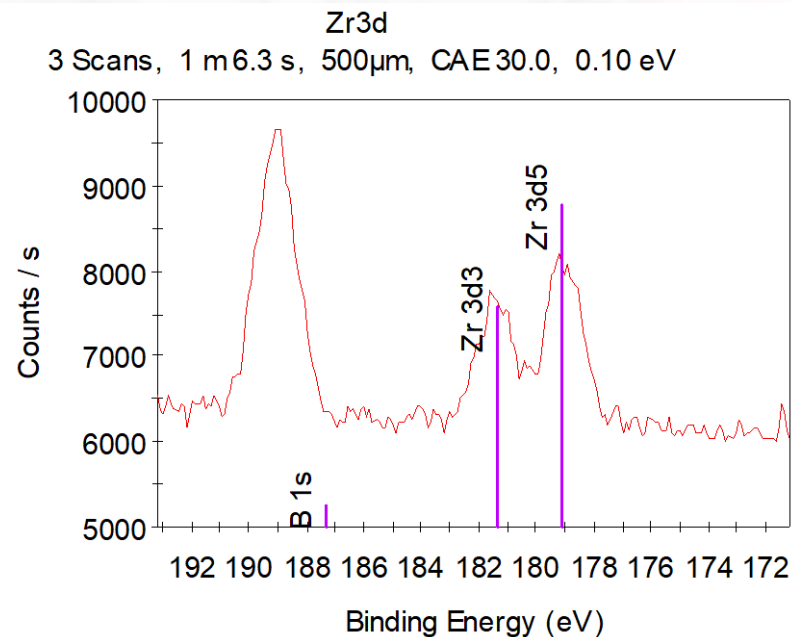
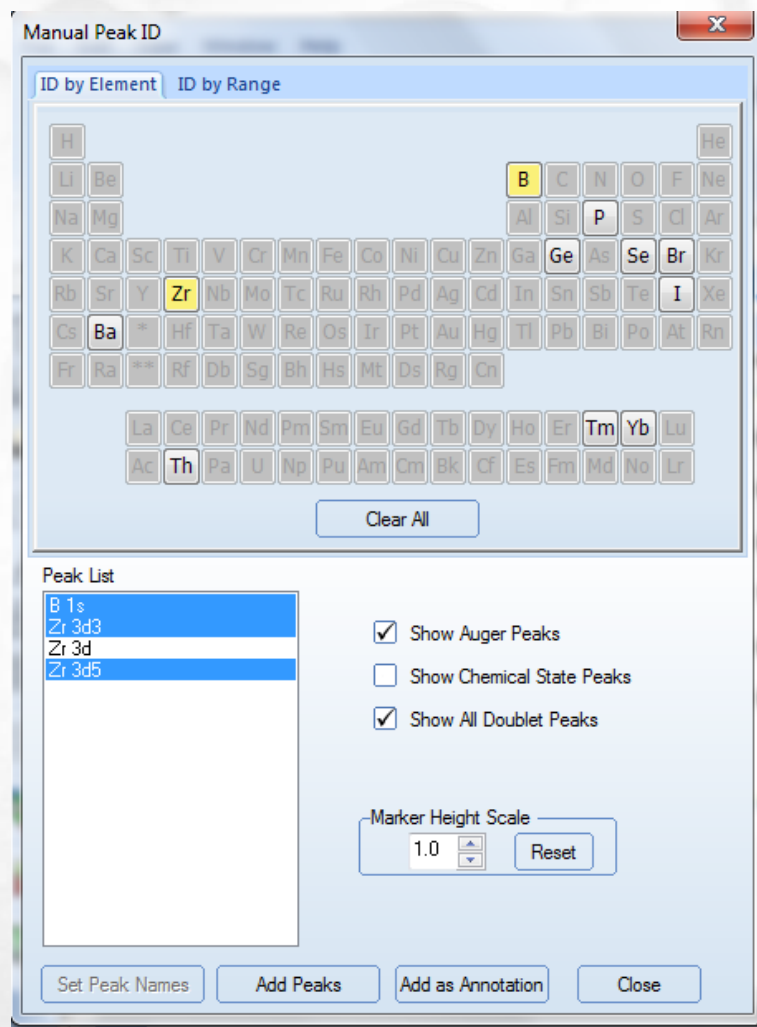
- 在进行定量时，一定要注意背底扣除范围是否与谱峰名称一致——这会影响定量结果的准确性

谱峰识别功能-全扫谱图元素自动定性判断



- 选定目标谱图
- File—Analysis—Survey ID

谱峰识别--高分辨窄扫谱图定性判断及干扰识别



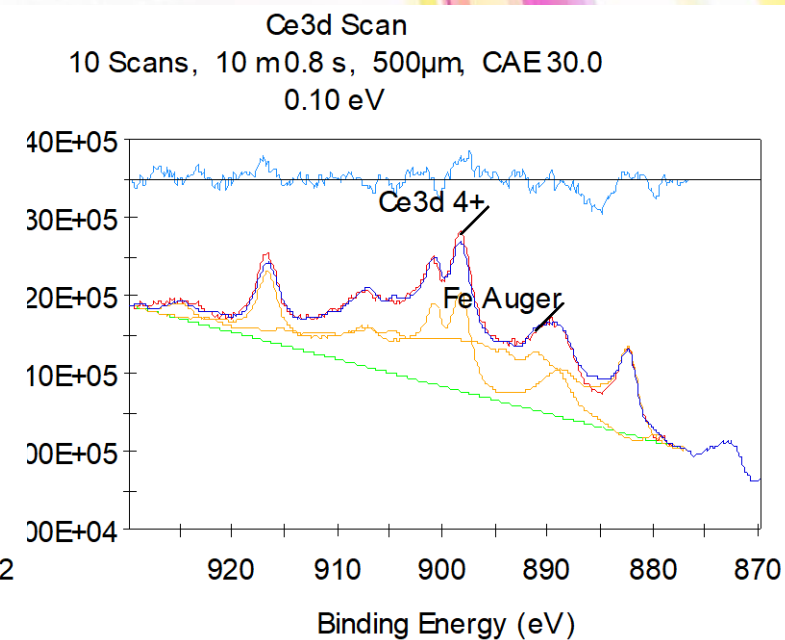
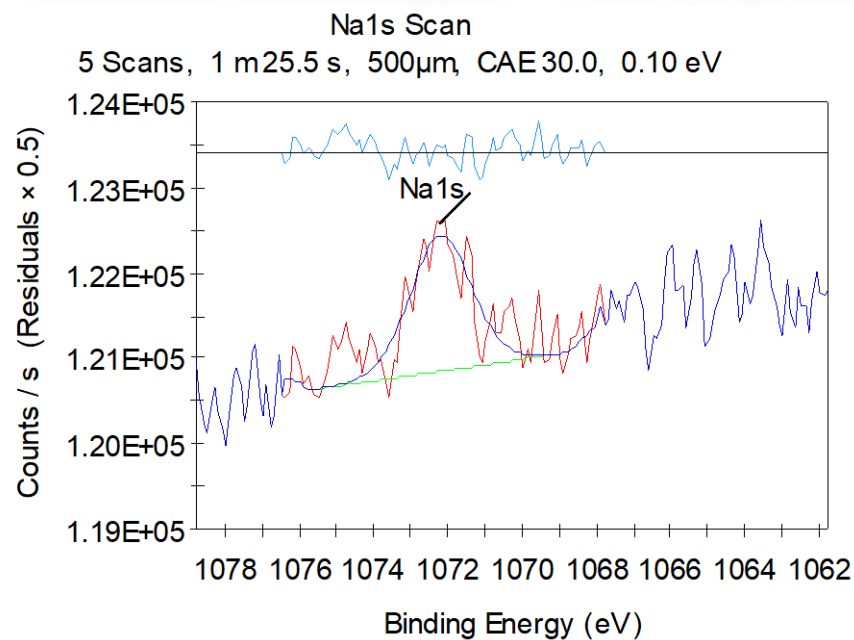
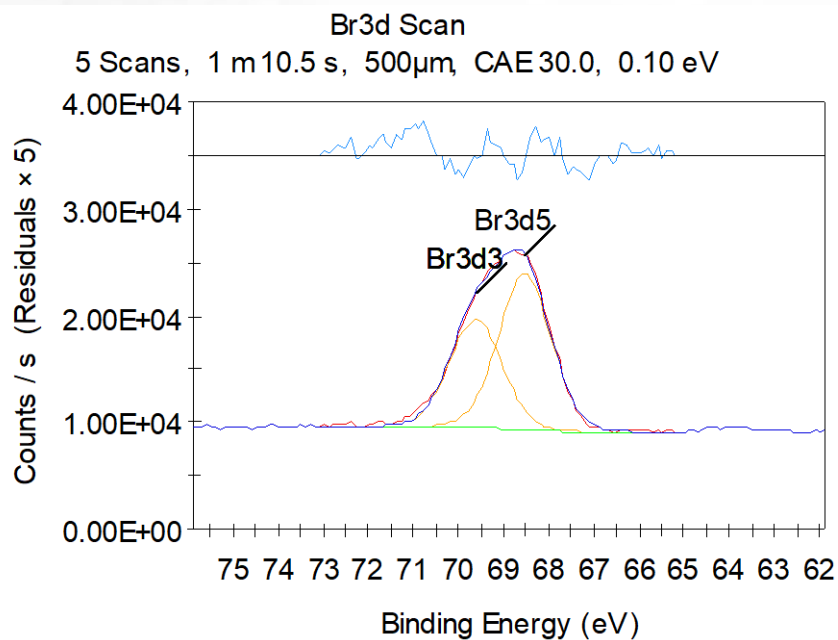
➤ 根据对样品的了解以及全扫谱图对样品进行的定性判定，确认谱峰的归属

几种常用XPS数据的拟合方法

1. 单峰拟合 2. 双峰拟合 3. 非线性最小二乘 (NLLSF) 拟合

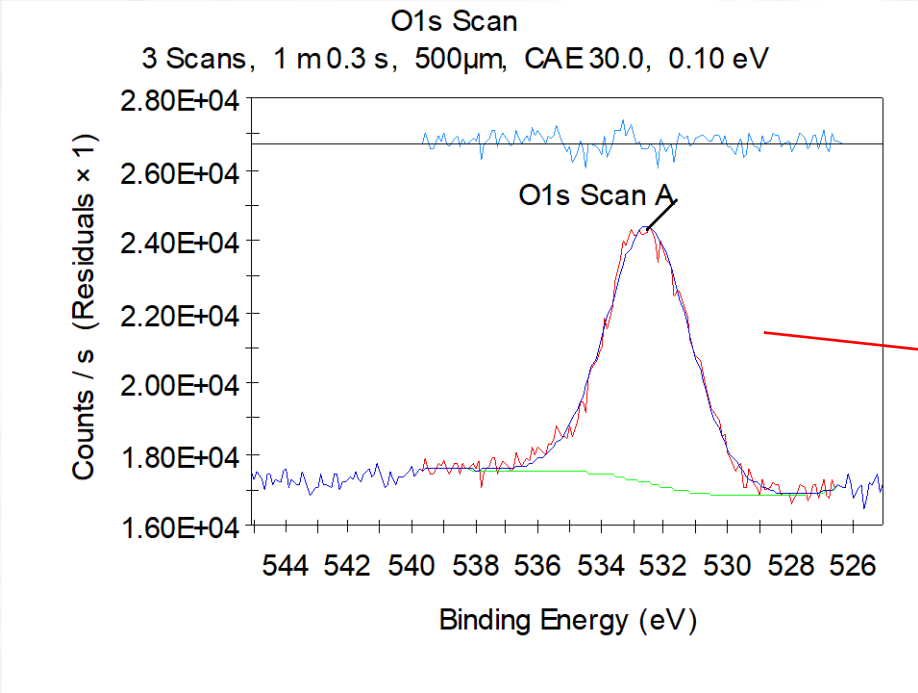
什么情况下需要进行拟合?

- 谱峰信噪比较差
- 谱峰重叠 (规则谱峰、不规则谱峰)



谱峰拟合-半高宽参数 (FWHM)

拟合谱峰个数???



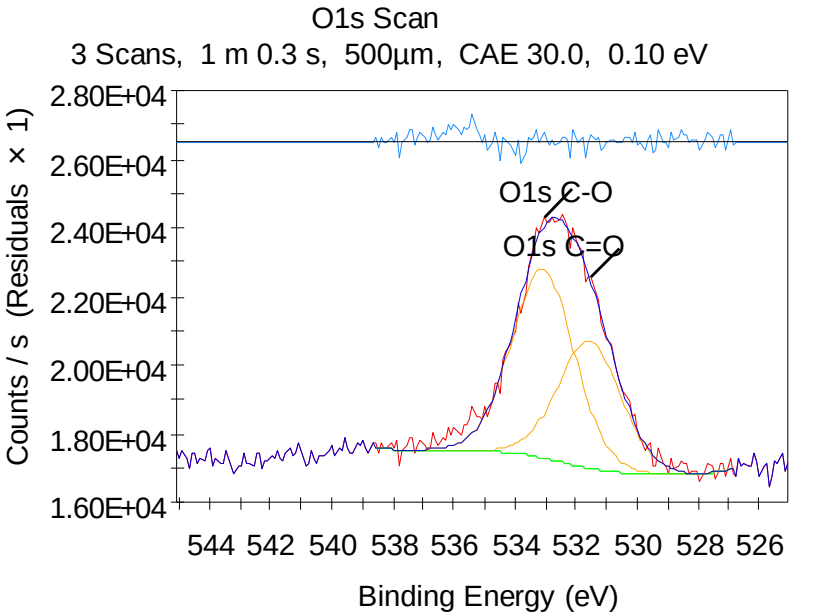
红色谱图为实测谱
蓝色谱图为拟合谱

Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)
O1s Scan A	532.50	7204.25	1.00	24415.11	1.00	3.25
						0.5 : 3.5

半高宽拟合参数

拟合后半高宽参数
在此处设置半高宽
拟合范围

Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)
O1s C=O	531.55	3696.75	0.67	9629.91	0.67	2.50
						0.5 : 2.5
O1s C-O	533.07	5478.16	1.00	14270.42	1.00	2.50
						0.5 : 2.5



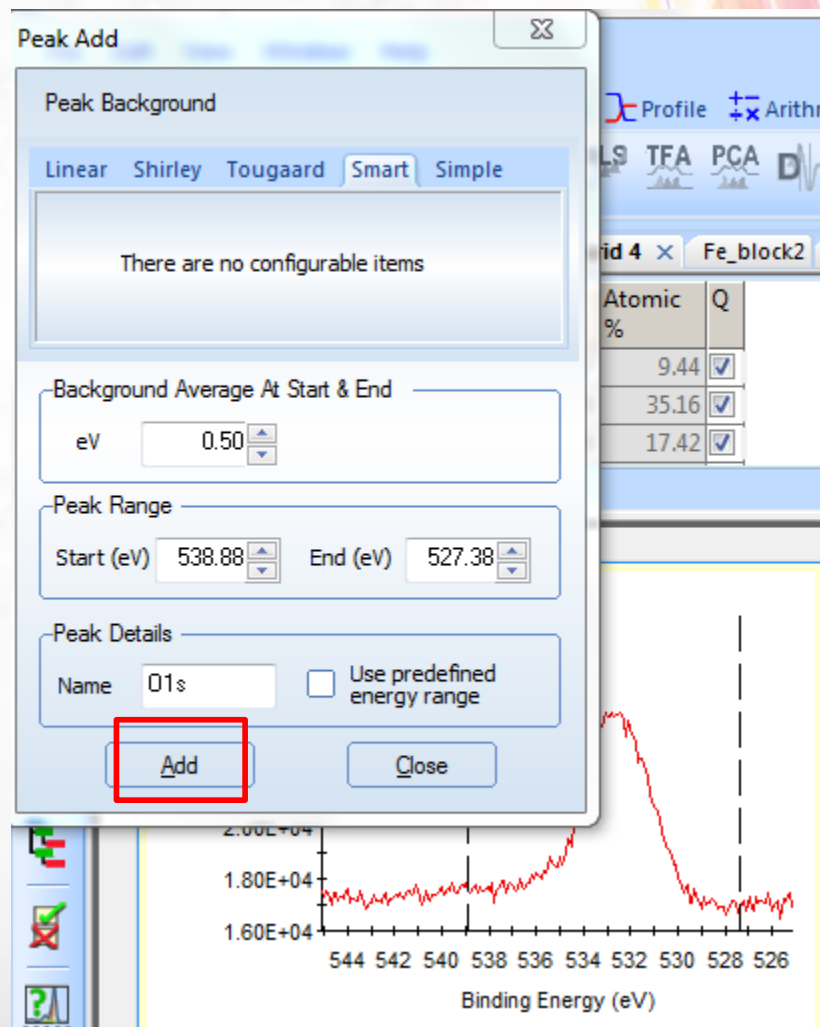
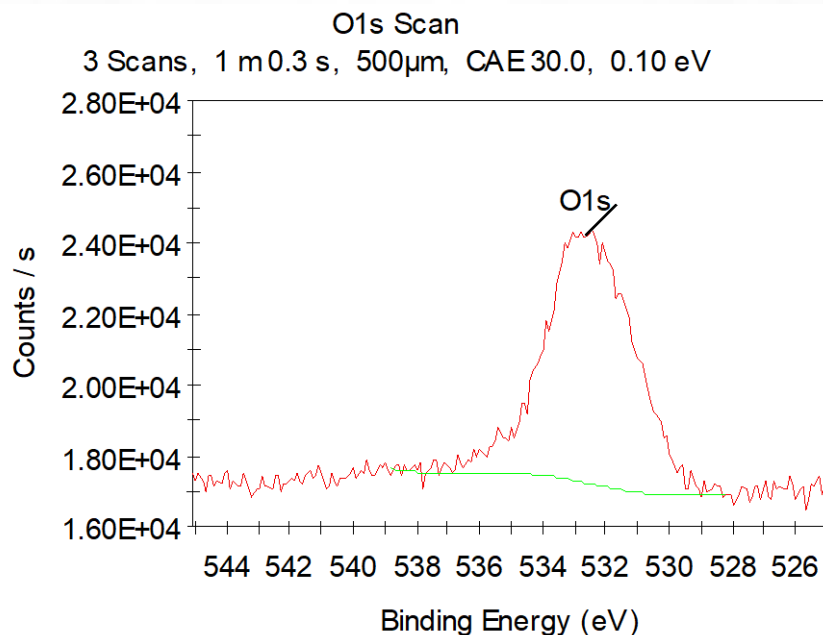
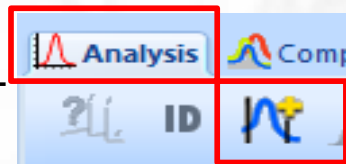
虽然两者拟合效果都比较好，但第一个谱图半高宽太宽，同时不满足样品实际，因此并不满足样品物理、化学意义

注：一般拟合半高宽范围是：0.5:2.5；建议控制在0.5:2

谱峰拟合—单峰拟合

背底扣除

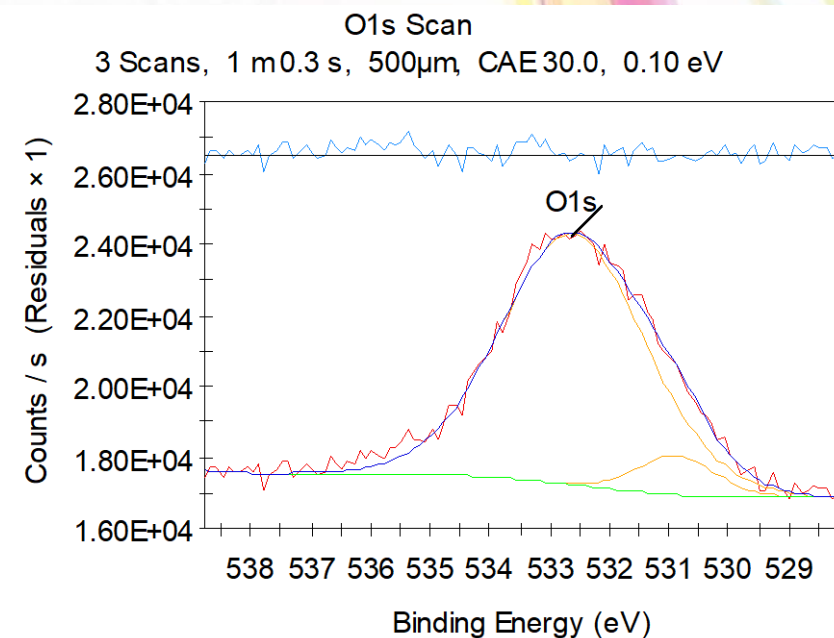
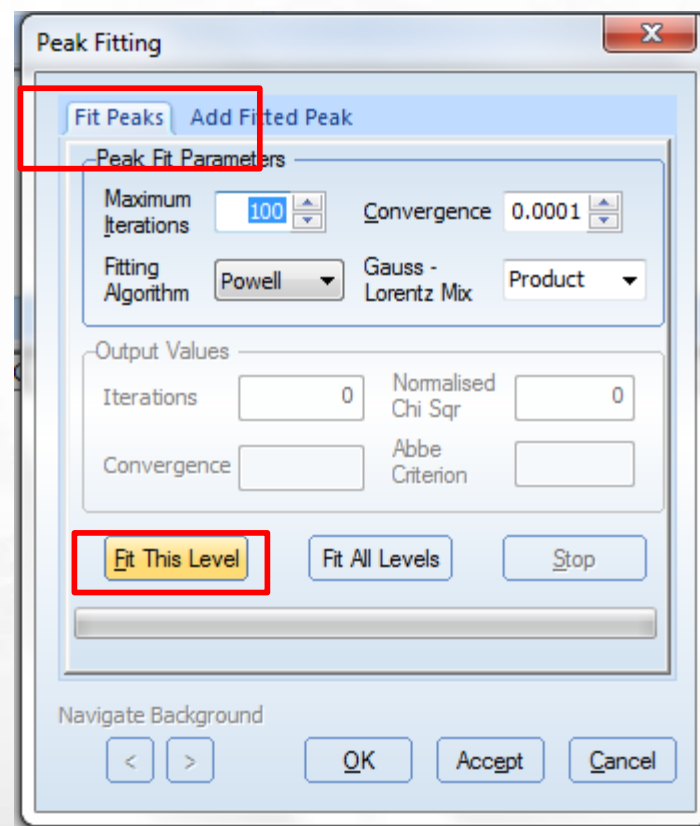
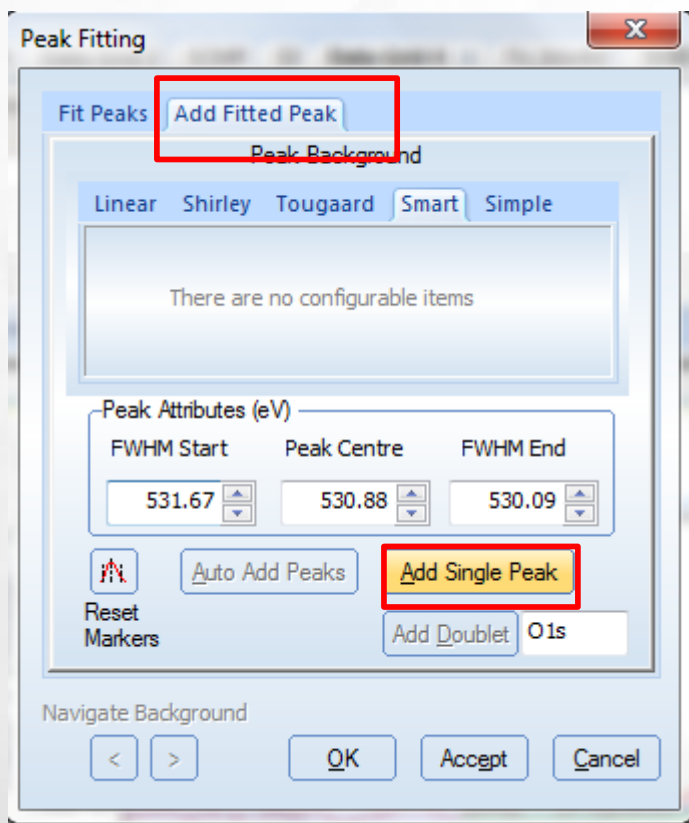
选中对应图谱-----Analysis-----背底扣
除(选择合适的区域)



谱峰拟合—单峰拟合

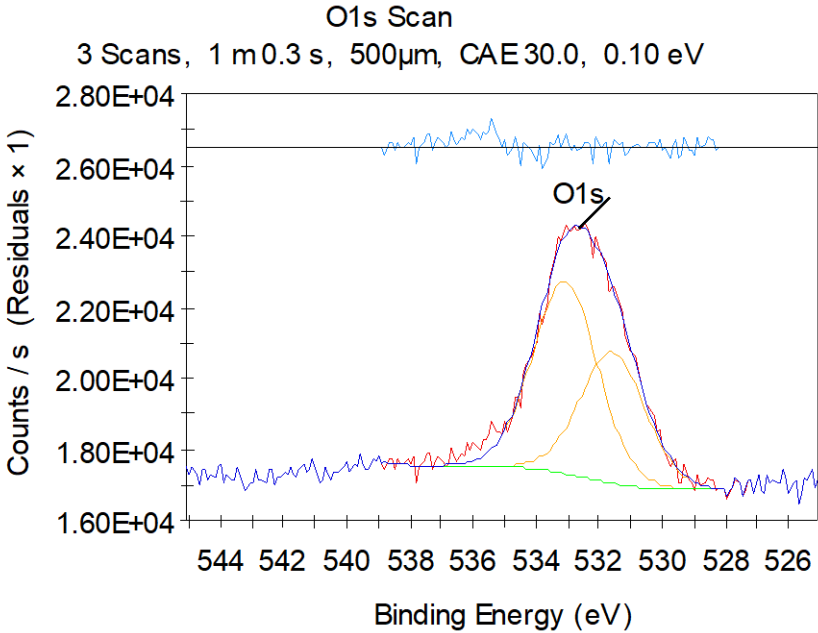
加单峰拟合

选中对应图谱-----Analysis----- -Add Fitted Peak
---Add Single Peak---Fit This Level



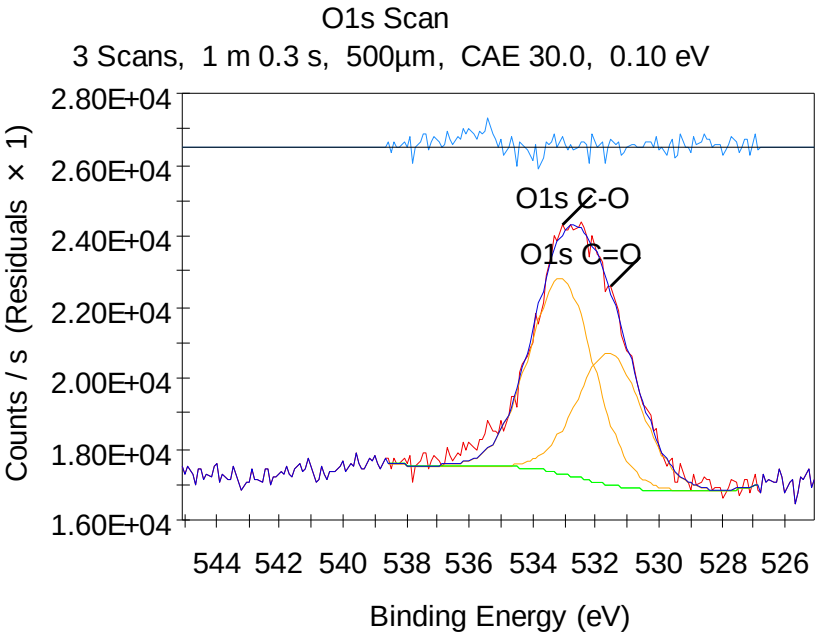
谱峰拟合——单峰拟合

谱峰化学态的命名、拟合参数的优化

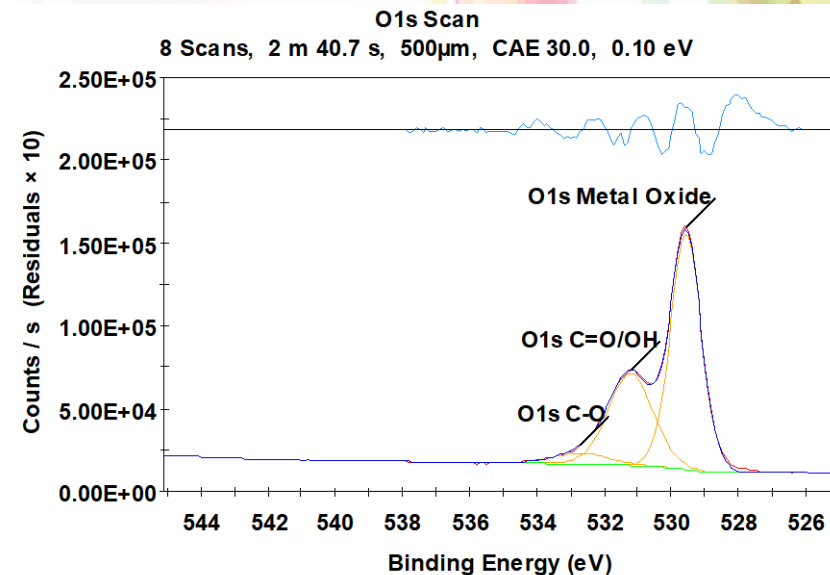
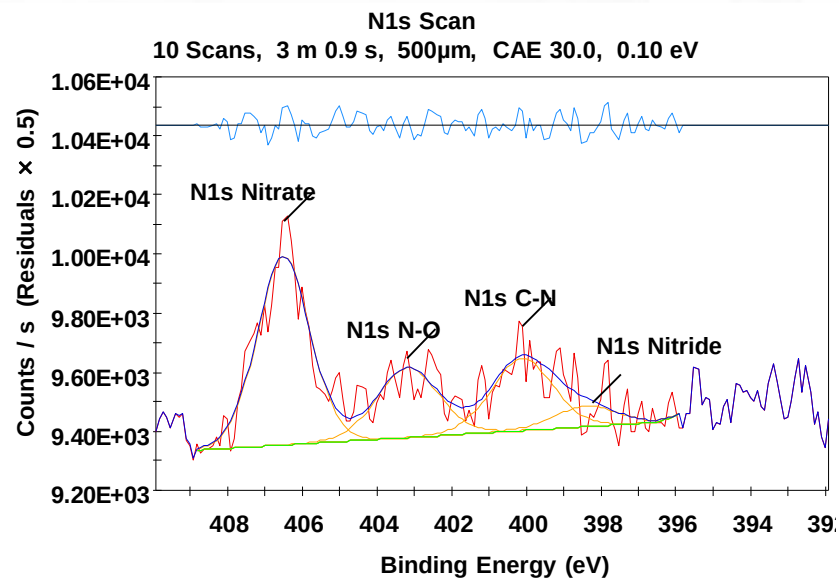
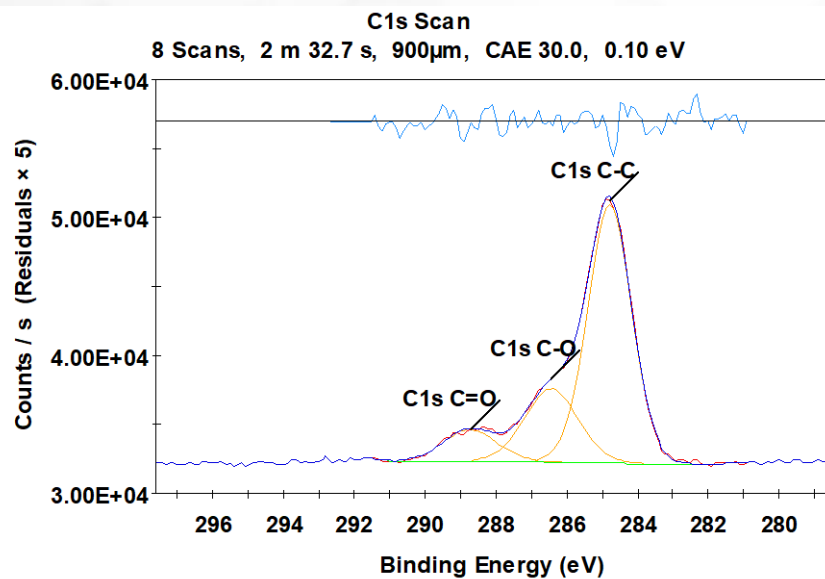


Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)
O1s C=O	531.55	3696.75	0.67	9629.91	0.67	2.50
						0.5 : 2.5
O1s C-O	533.07	5478.16	1.00	14270.42	1.00	2.50
						0.5 : 2.5

Ref.	Name	Peak BE	Height CPS	Height Ratio	Area CPS.eV	Area Ratio	FWHM fit param (eV)	L/G Mix (%) Product
E	O1s	533.08	5406.32	1.00	14083.28	1.00	2.50	30.00
							0.5 : 2.5	fixed
F	O1s Scan A	531.58	3696.25	0.68	9628.60	0.68	2.50	30.00
							0.5 : 2.5	fixed



其它元素单峰拟合举例

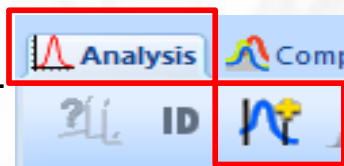


谱峰拟合——双峰拟合

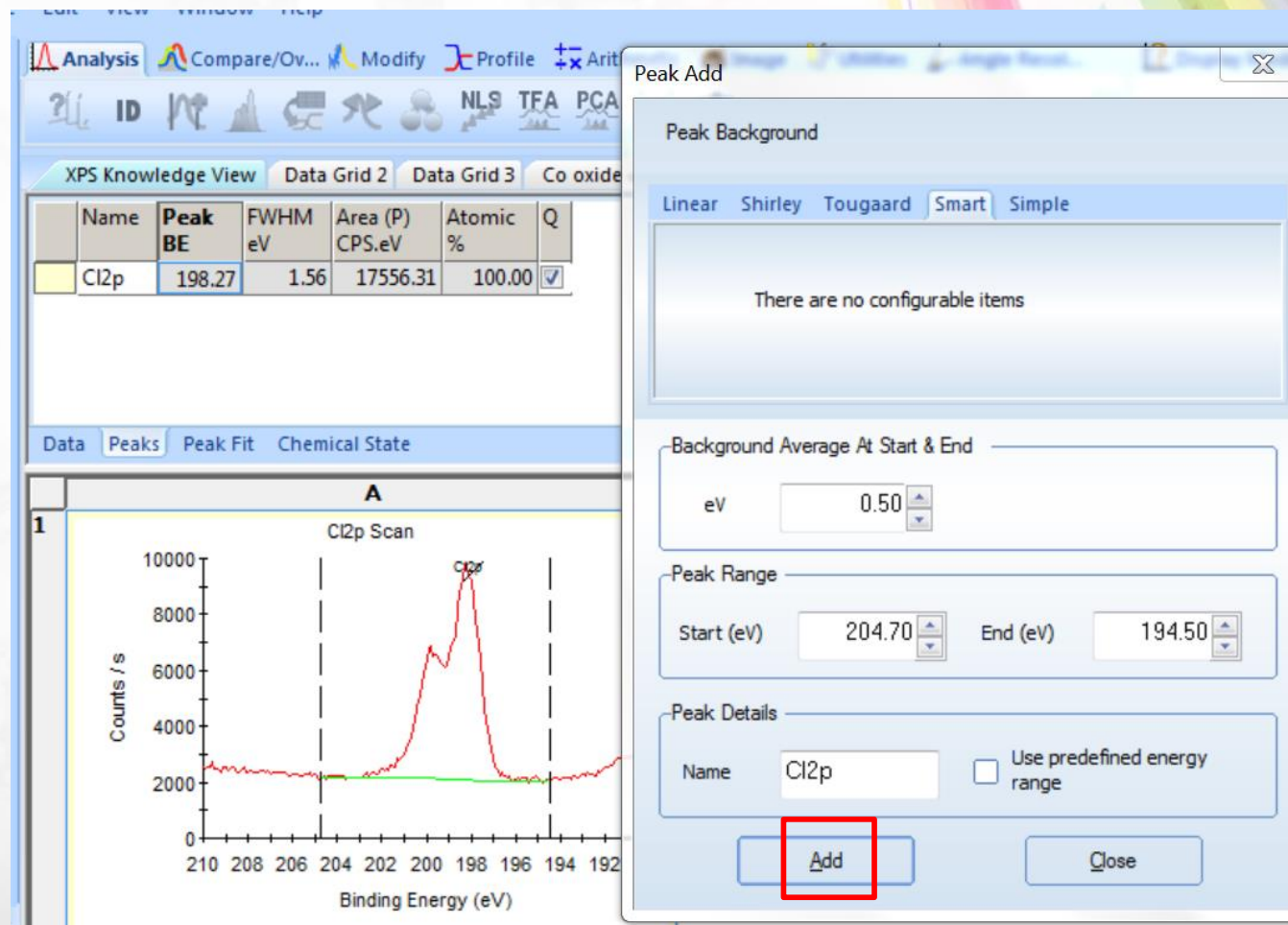
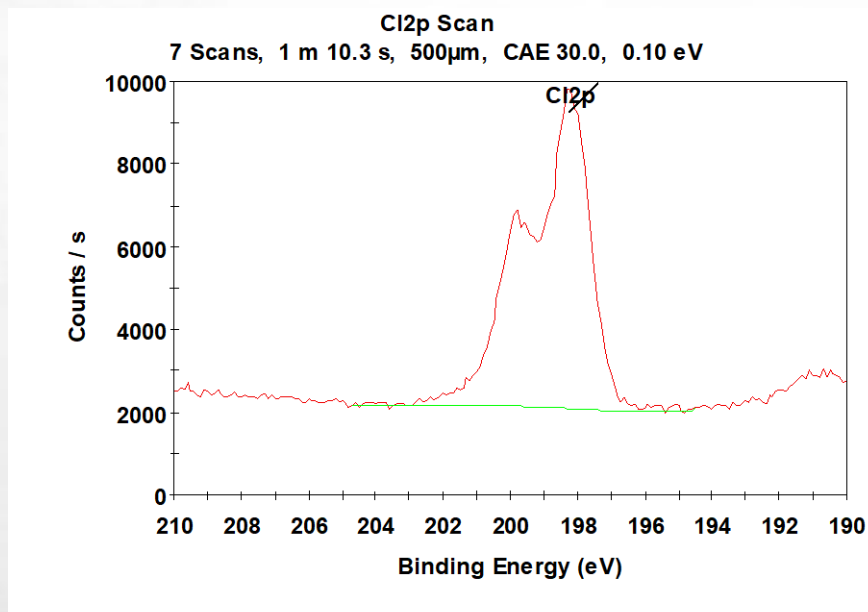
加峰前准备-调整加峰位置

背底扣除

选中对应图谱-----Analysis-----
除(选择合适的区域)

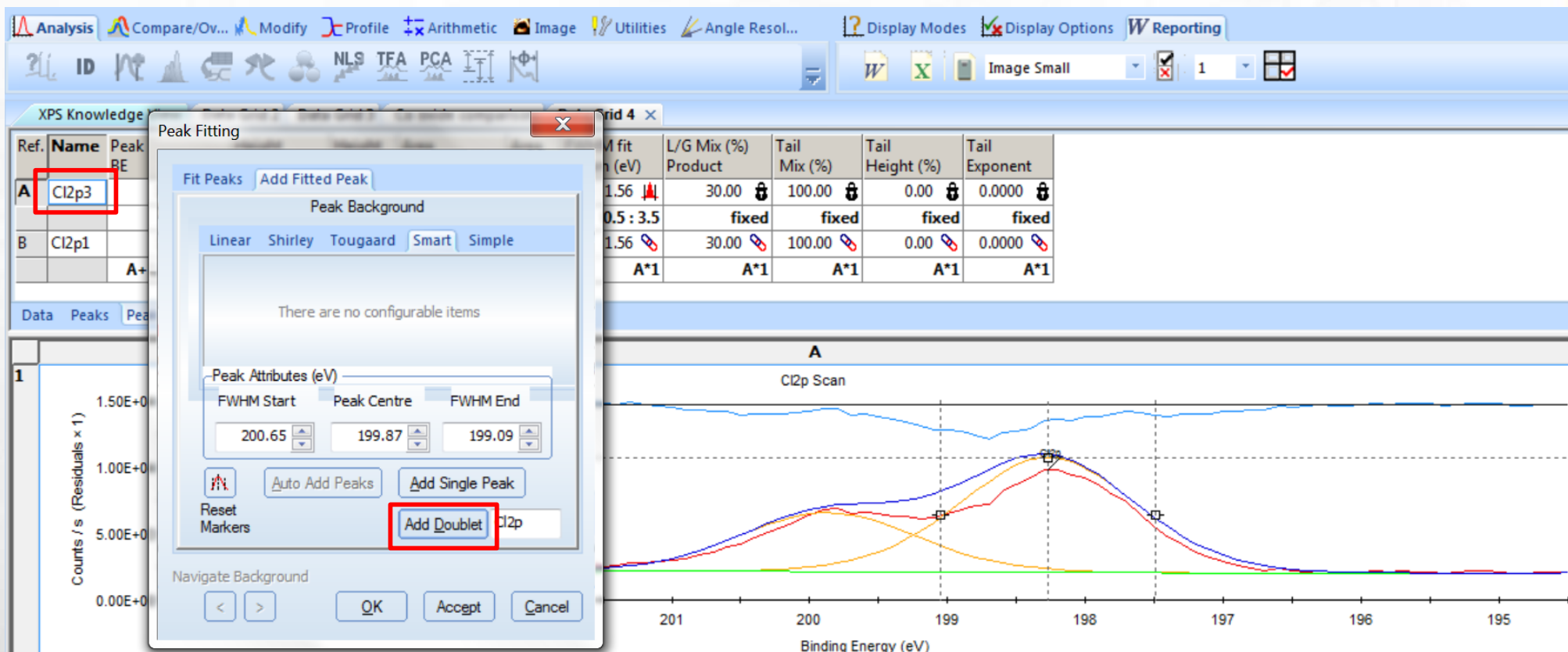


背底扣



谱峰拟合——双峰拟合

加双峰拟合
选中对应图谱-----Analysis----- -Add Fitted Peak
---Add Single Peak---Fit This Level



谱峰拟合——双峰拟合

Peak Fitting

Fit Peaks Add Fitted Peak

Peak Fit Parameters

Maximum Iterations: 100 Convergence: 0.0001

Fitting Algorithm: Powell Gauss - Lorentz Mix Product

Output Values

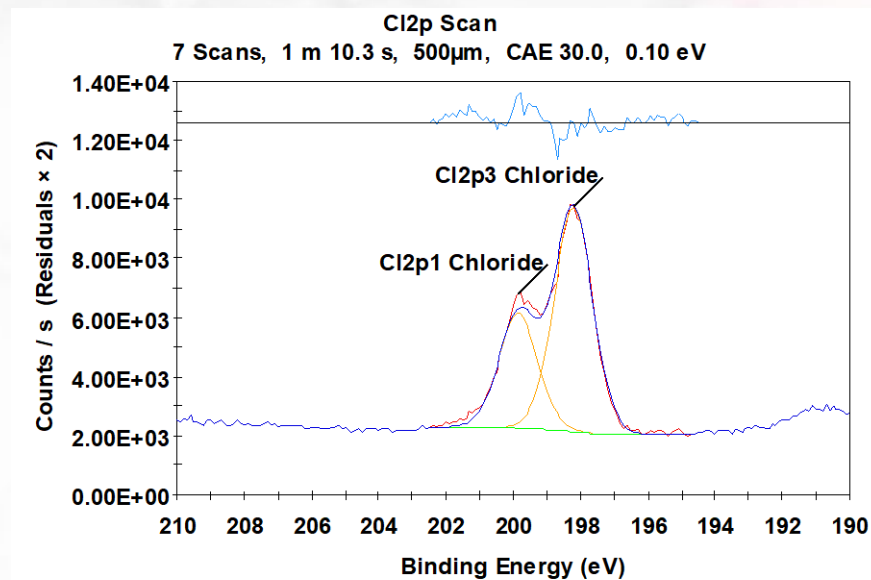
Iterations: 0 Normalised Chi Sqr: 0

Convergence: Abbe Criterion

Fit This Level Fit All Levels Stop

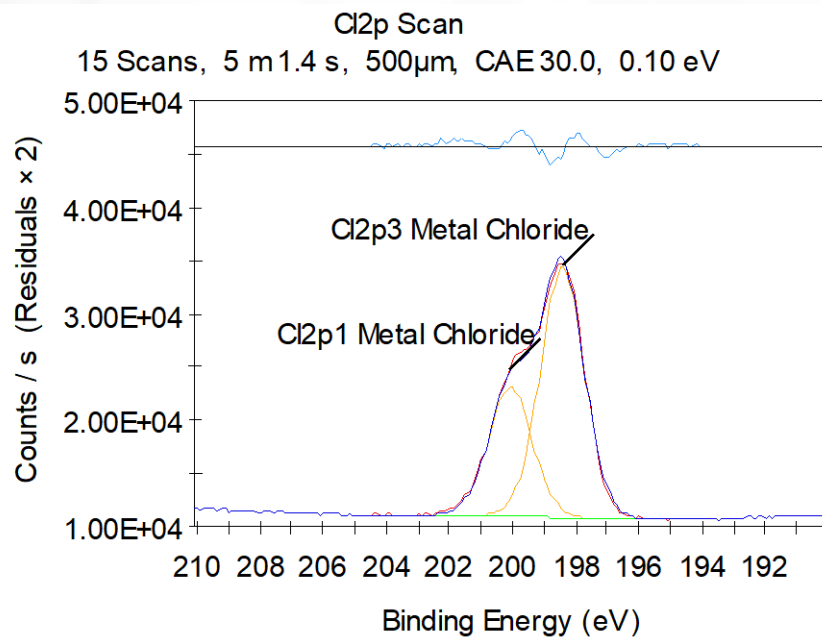
Navigate Background

< > OK Accept Cancel



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
I	Cl2p3 Metal Chloride	198.42	23540.08	1.00	40839.48	1.00	1.66	30.00	100.00	0.00	0.0000
							0.5 : 2.5	fixed	fixed	fixed	fixed
J	Cl2p1 Metal Chloride	200.07	12081.83	0.51	20960.66	0.51	1.66	30.00	100.00	0.00	0.0000
		I+1.60 (±0.1)	I*0.513				I*1	I*1	I*1	I*1	I*1

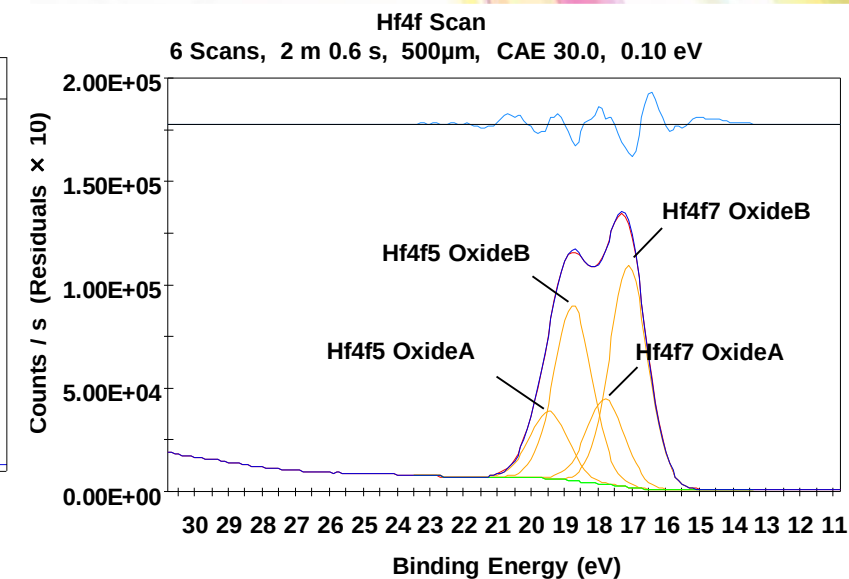
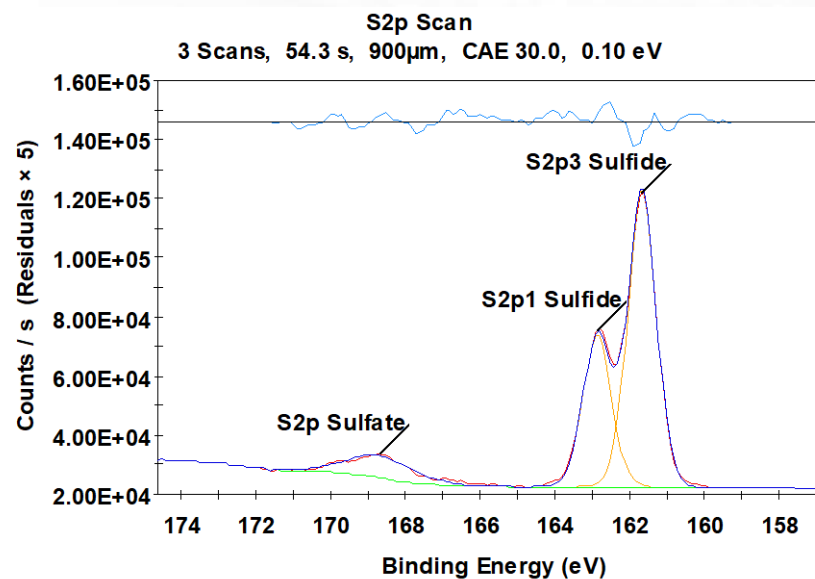
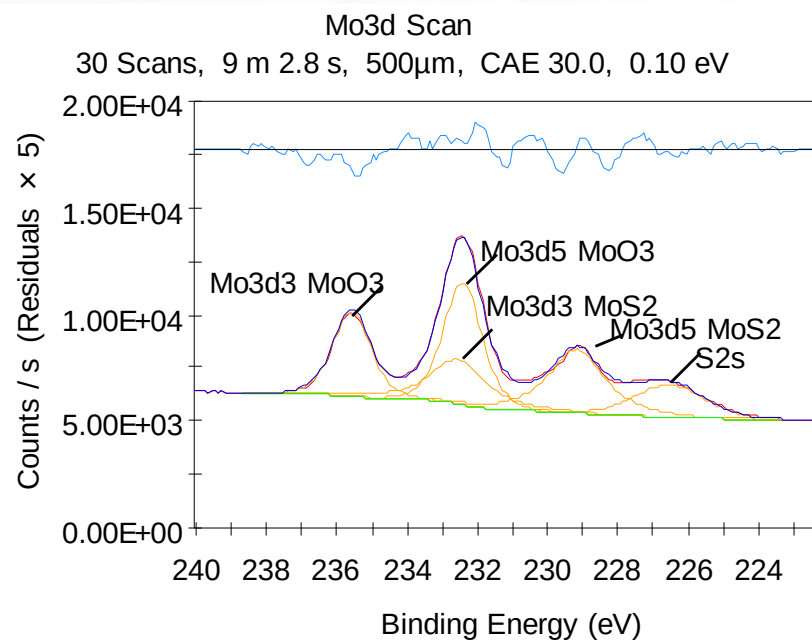
Data Peaks Peak Fit Chemical State



Cl2p3 Metal Chloride	198.42	1.60	40839.48	14.87	☒
Cl2p1 Metal Chloride	200.07	1.60	20960.56	0.00	☐
S2p Sulfate	168.28	2.37	931.3	0.32	☒
S2p3 Thiol	163.29	1.37	1061.40	0.55	☒
S2p1 Thiol	164.53	1.37	542.8	0.00	☐

Data Peaks Peak Fit Chemical State

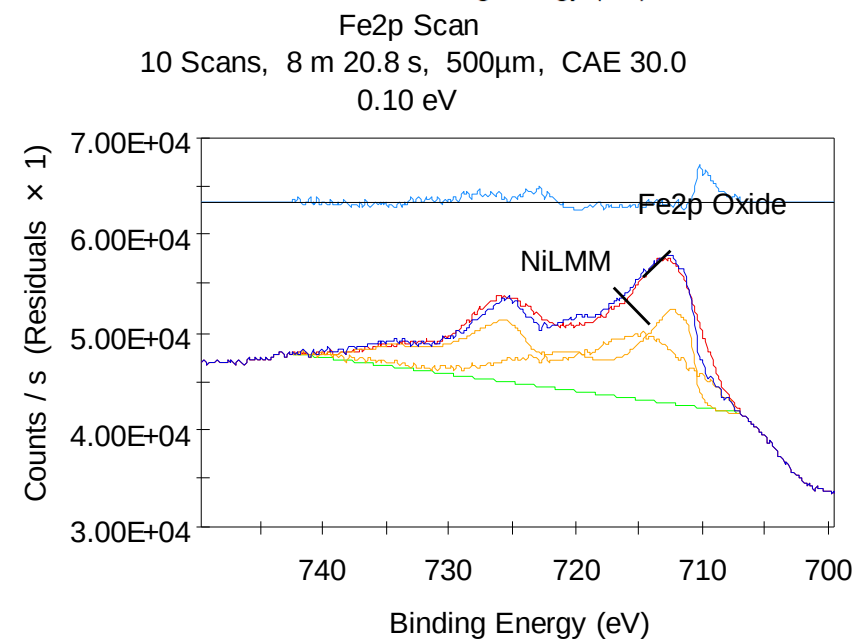
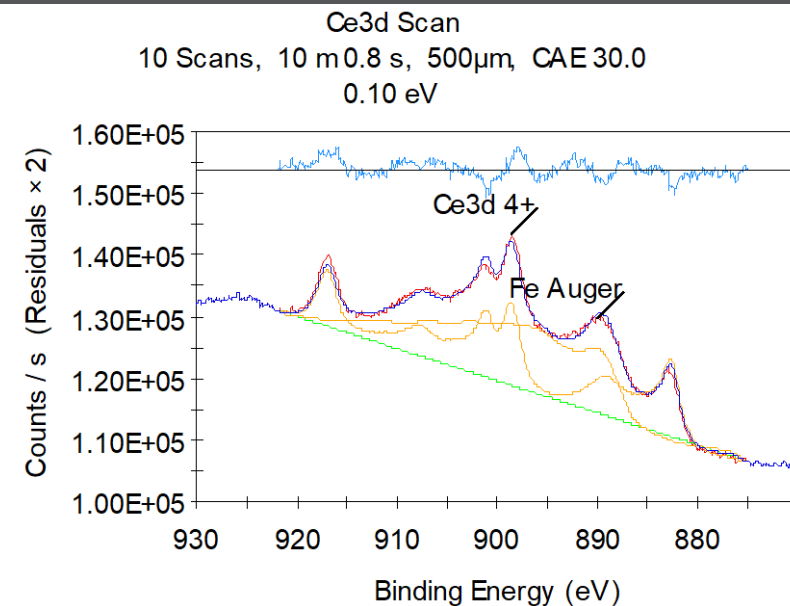
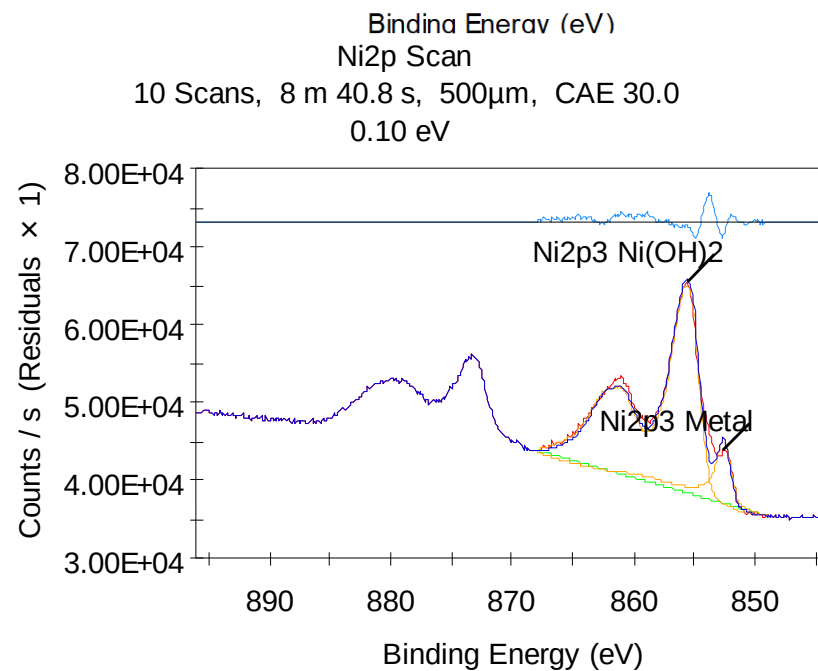
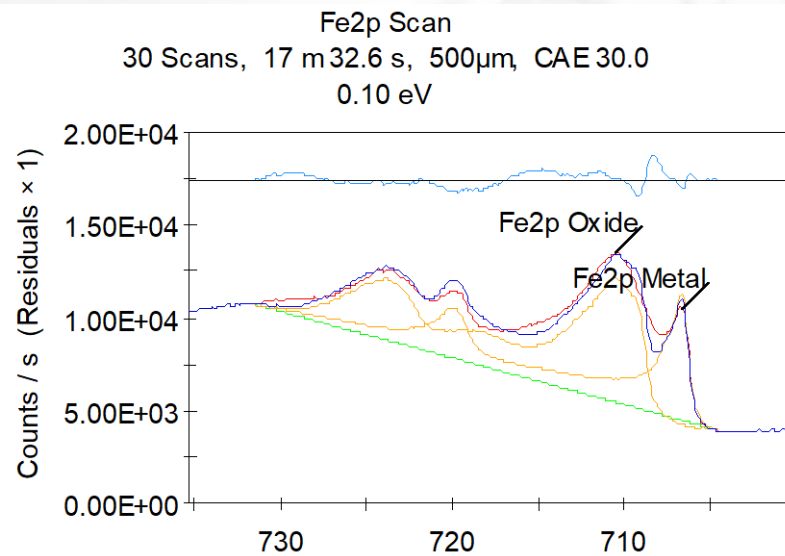
其它元素双峰拟合举例



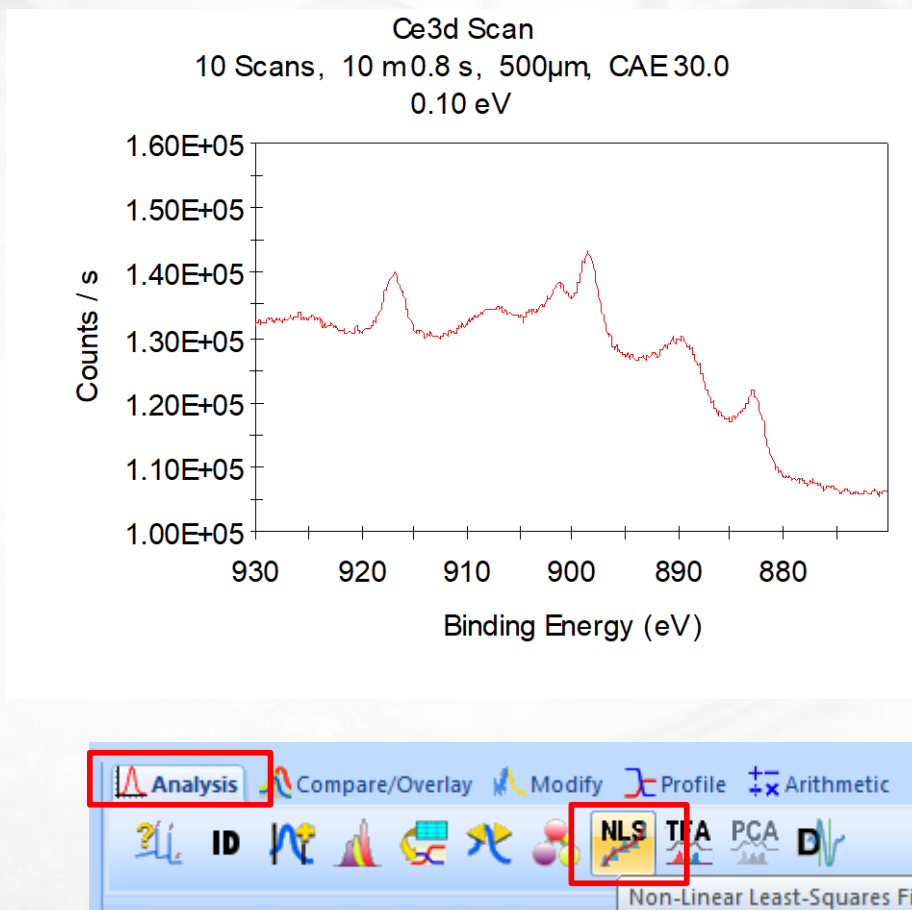
非线性最小二乘拟合(NLLSF)

- NLSSF是一种拟合功能。这种方法仅除了通过改变线性因子的强度（Intensity）来得到最好的拟合结果外，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。
- 用户通过将参考谱图载入到Avantage软件中来指定其作为NLLSF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

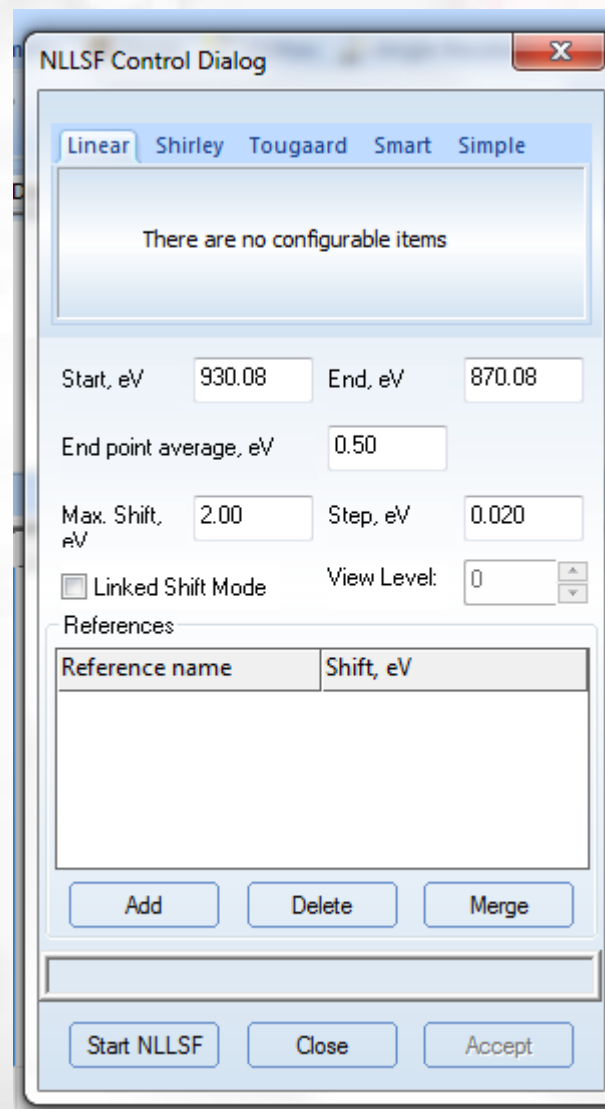
NLLSF案例展示



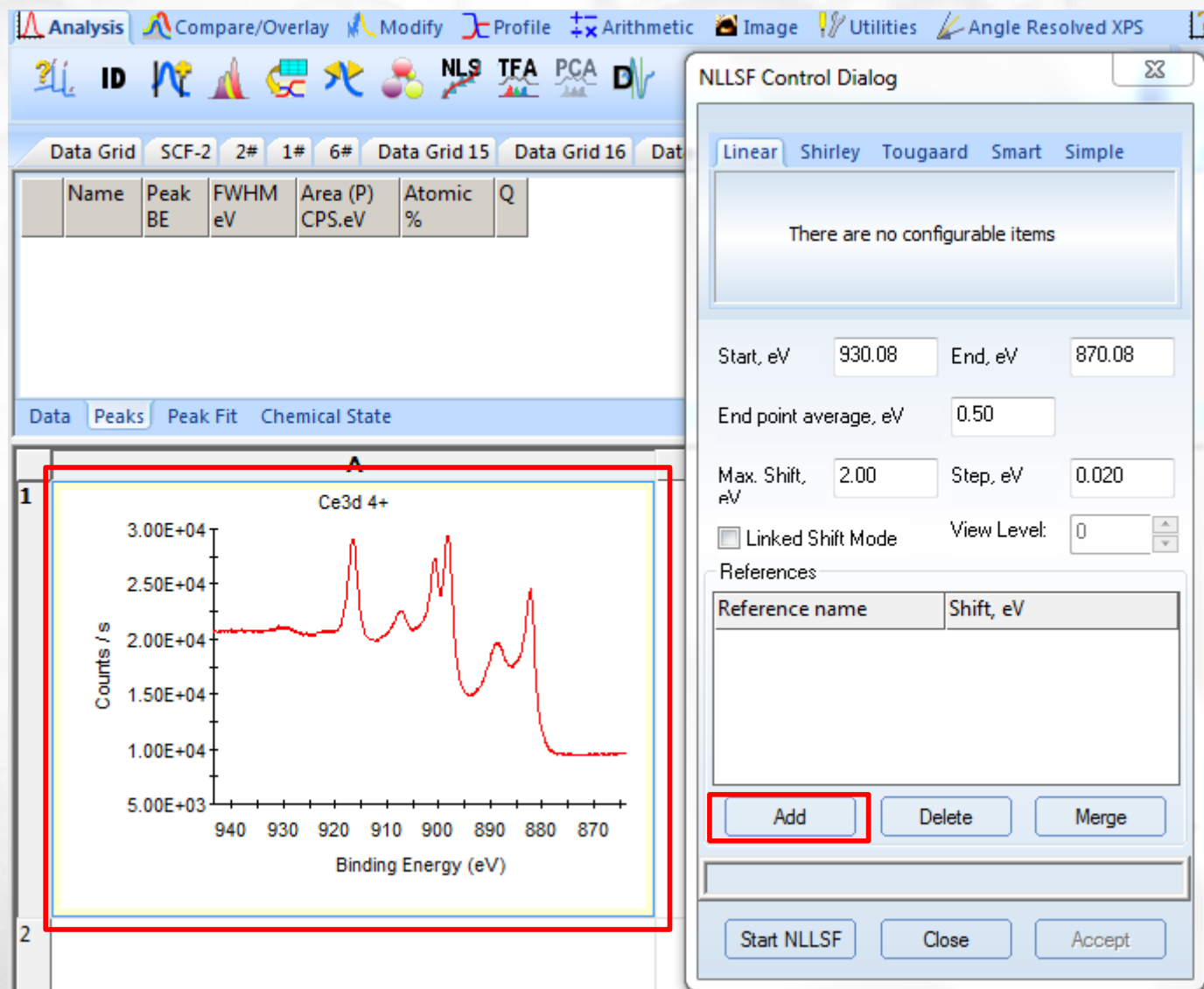
NLLSF演示-F Auger对Ce3d谱峰干扰



选中想要进行拟合的图谱-----Analysis--点
击NLSF拟合键之后， 出来一个对话框

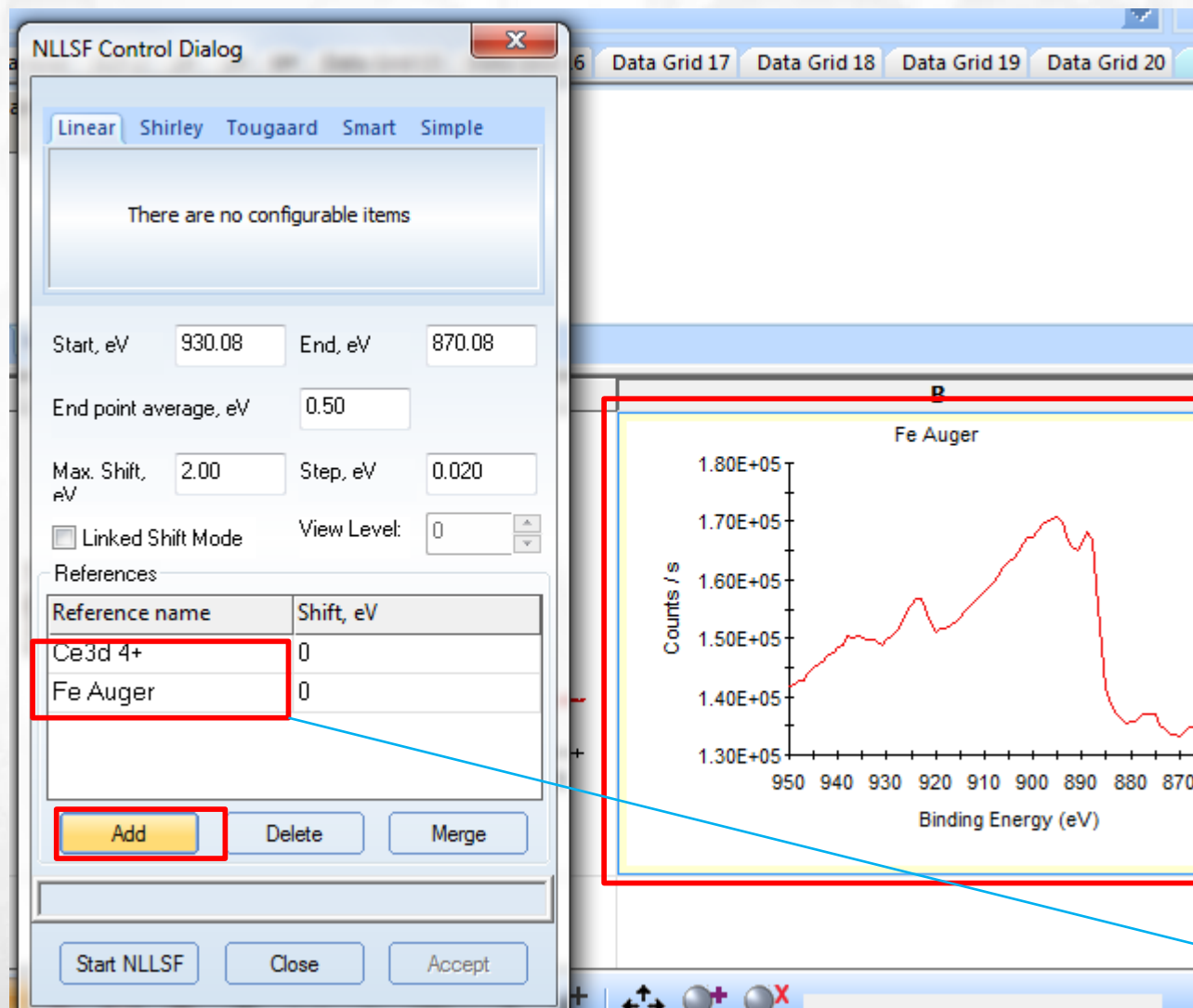


NLLSF演示



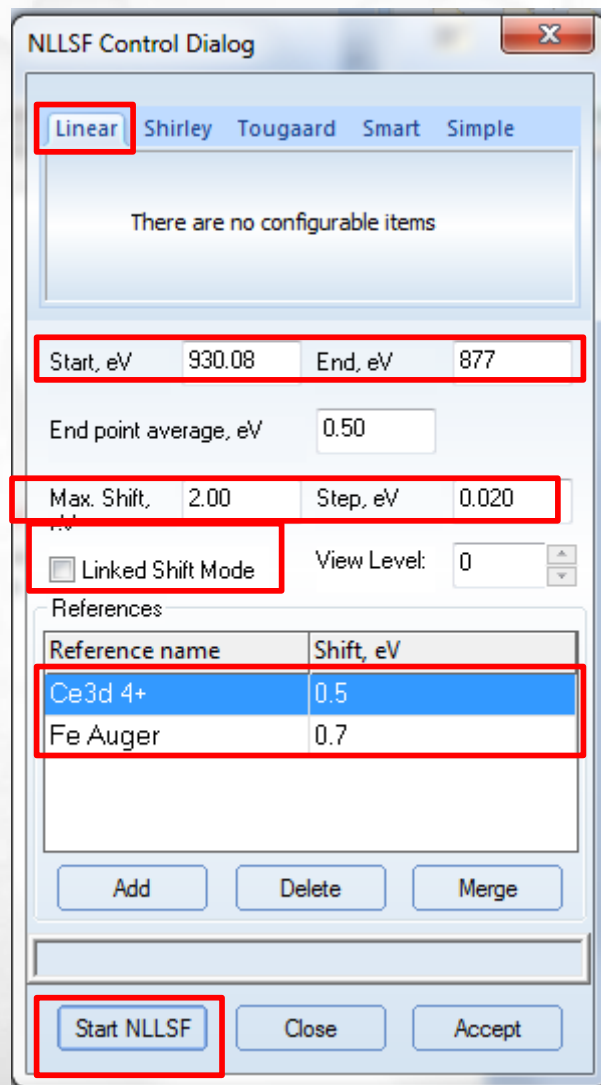
选中对应参考图谱
-----点击Add

NLLSF演示



选中对应参考图谱
-----点击Add

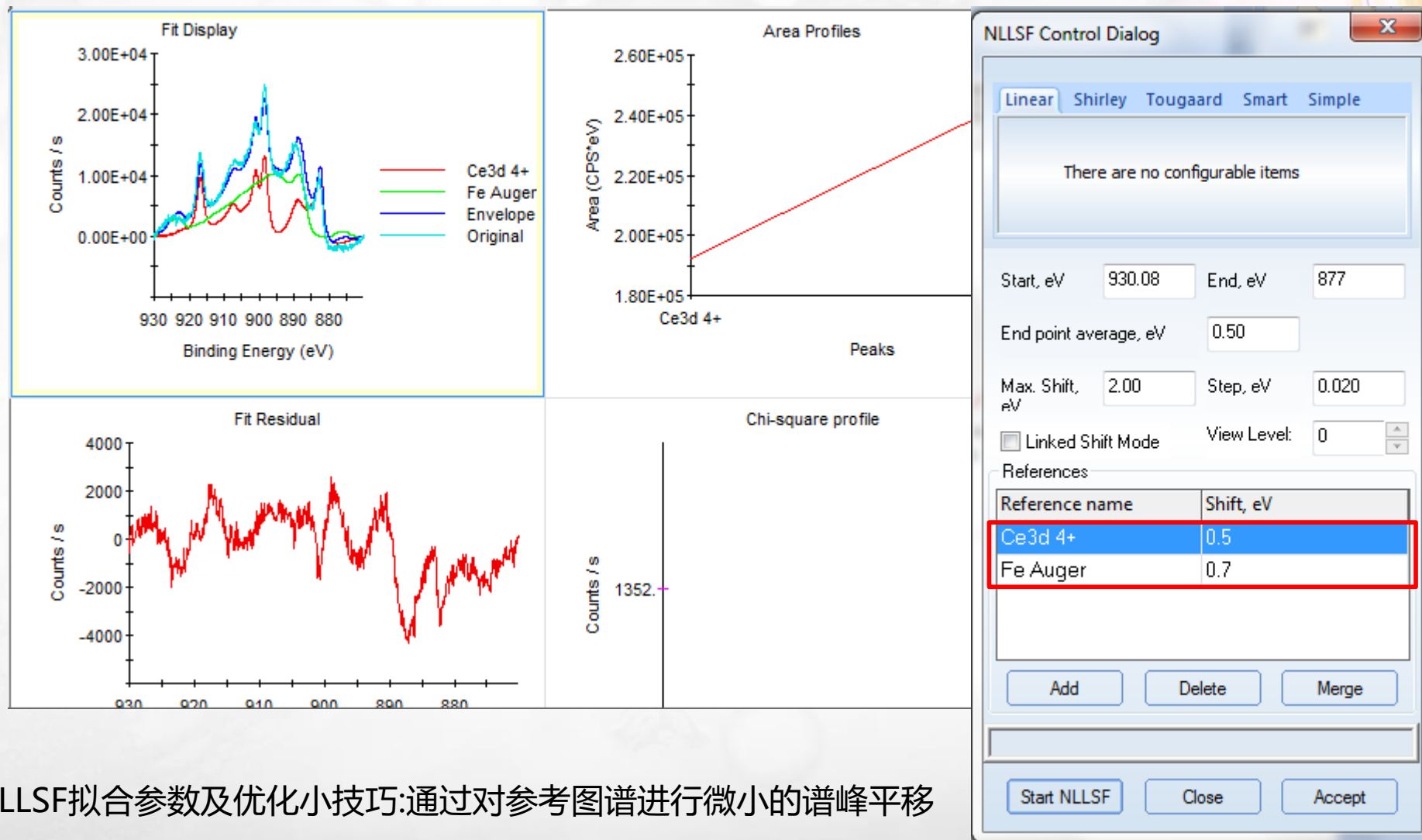
可对名称进行更改



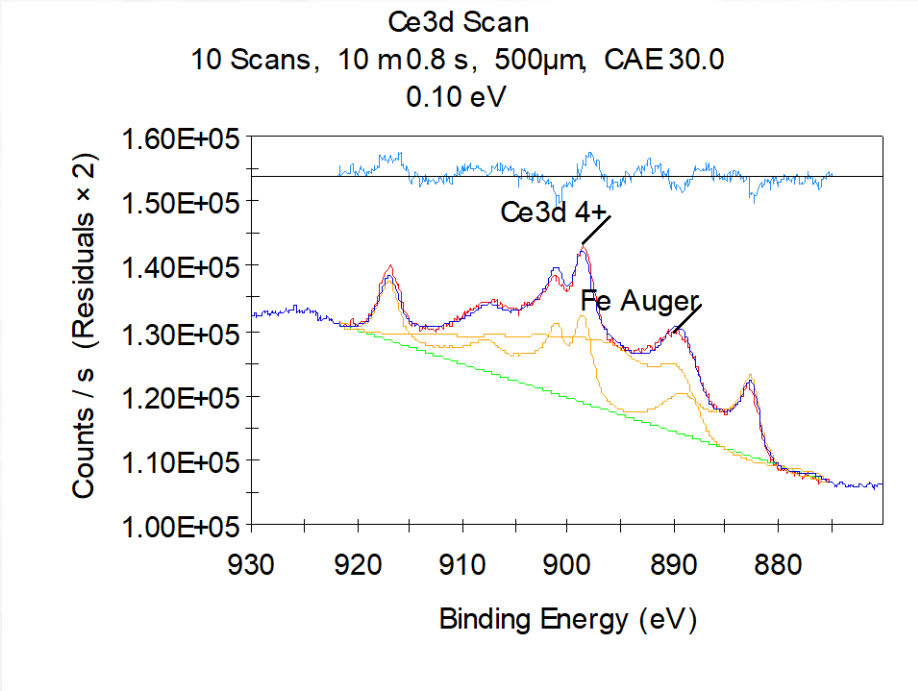
- 最上方是背底扣除方法选择——因为参考图谱带有背景信息，因此选用linear
- 其次是拟合范围——去掉一些非特征范围，缩小范围
- 谱图允许移动范围以及步长精度——可以适当放大允许拟合时，参考图谱的左右移动范围

NLLSF拟合参数及优化小技巧

NLLSF演示



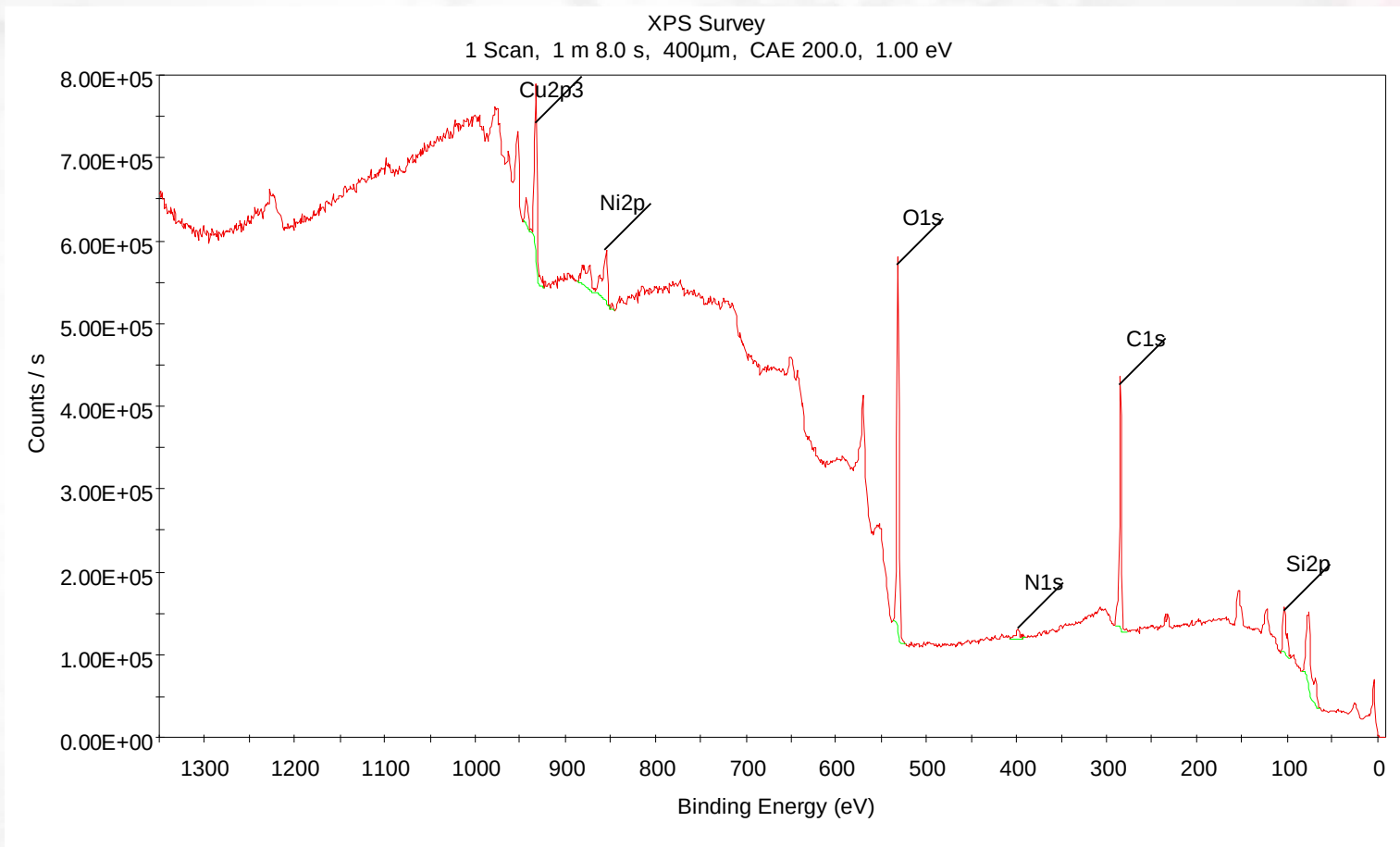
NLLSF拟合参数及优化小技巧:通过对参考图谱进行微小的谱峰平移



	Ce3d 4+	898.52	1.92	192443.65	2.73	☒
	Fe Auger	889.90	4.08	210082.91	0.00	☐

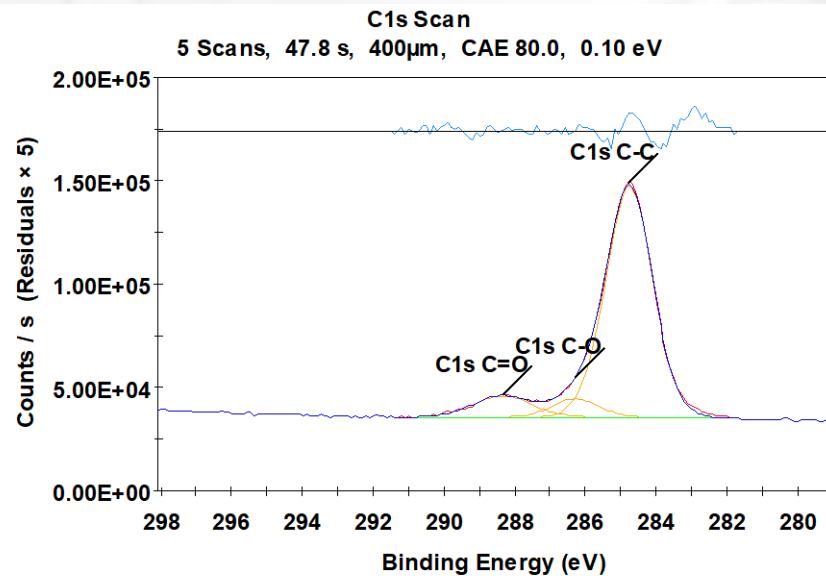
注意事项-定量

● 样品测试案例分享

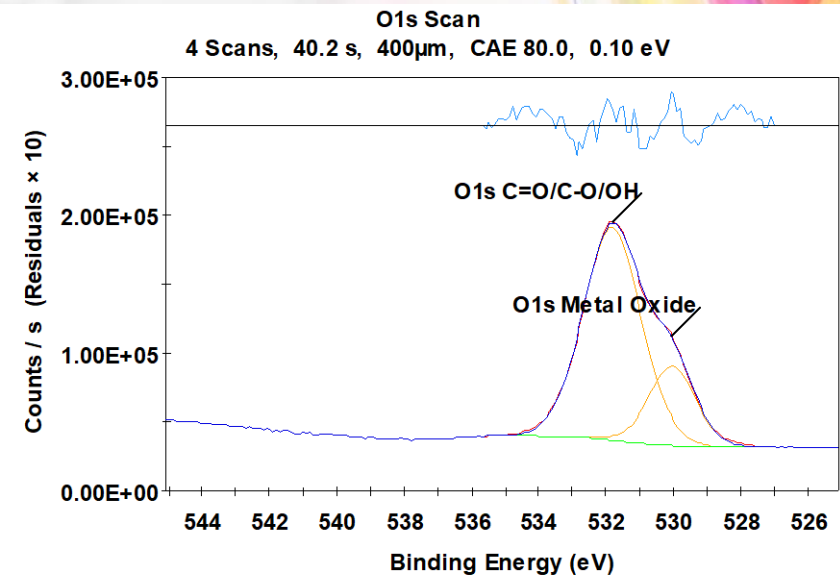


- 通过Avantage软件中的全谱谱峰识别功能 (Survey ID) 对全谱进行识别, 可看出样品表面含有 Cu、Ni、O、N、C、Si等元素

精细窄扫—C、O



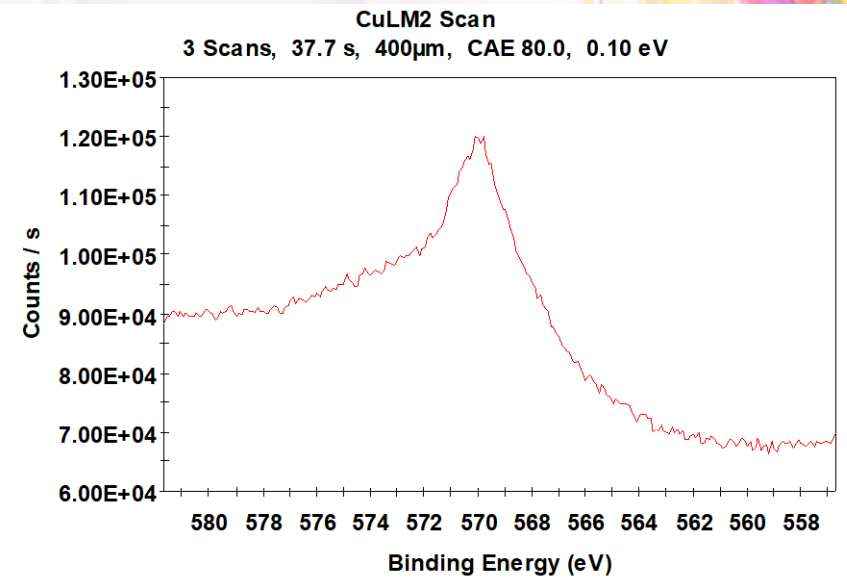
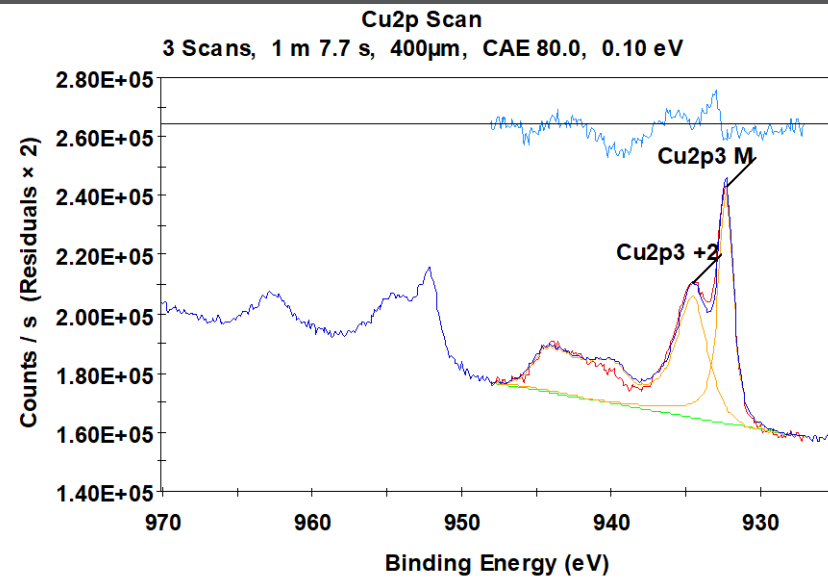
Chemical state	Binding energy C1s / eV
C-C	284.8
C-O-C	286
O-C=O	288.5



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

- 样品中的C主要以可能的C-C、C-O、C=O的形式存在
- 样品中的O元素主要以可能的C=O/C-O/OH、金属氧化物的形式存在

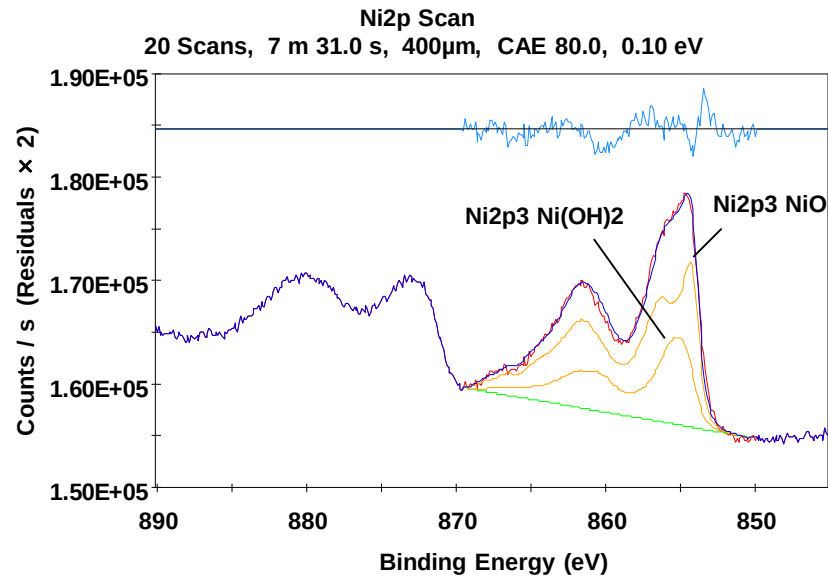
精细窄扫—Cu



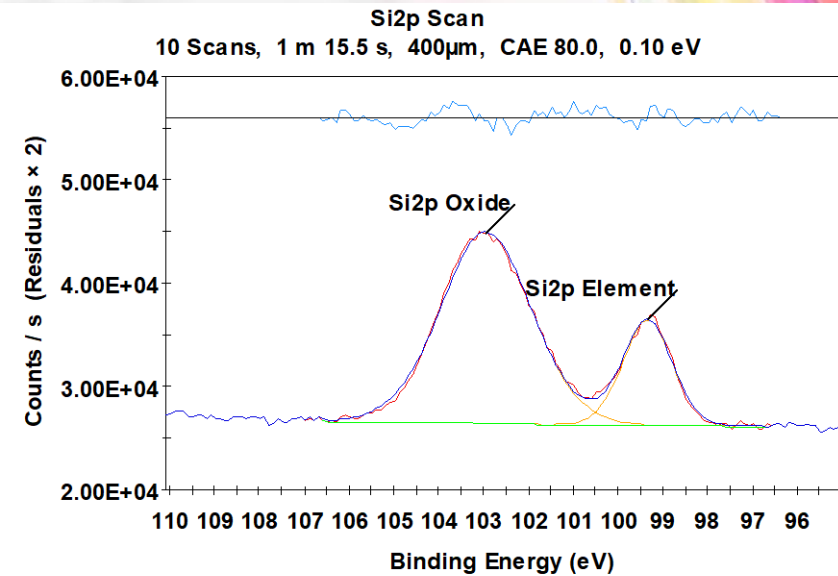
Chemical state	Binding energy Cu2p _{3/2} / eV
Cu metal	932.6
Cu (I) oxide	932.7
Cu (II) oxide	933.1
Cu (II) carbonate dihydroxide	934.8
Cu (II) phthalocyanine	935.2

- 通过软件独有的NLLFS拟合功能对Cu元素复杂谱图进行拟合，取得了较好拟合效果，可看到样品中Cu元素主要以+2价氧化态和单质态的形式存在。

精细窄扫— Ni、 Si



Chemical state	Binding energy Ni2p _{3/2} / eV
Ni metal	852.6
NiO	853.7
Ni(OH) ₂	855.6



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

- 样品中含Ni元素，通过软件独有的NLLFS功能来对Ni复杂谱图进行拟合，取得较好拟合效果，可看到其主要以可能的Ni(OH)₂、NiO的形式存在
- 样品中Si元素主要以氧化态、可能的单质态的形式存在

样品相对定量结果

各化学态下元素相对含量/Atomic %

化学态	含量/%
C1s C-C	36.19
C1s C-O/C-N	2.92
C1s C=O	4.24
Cu2p3 +2	4.25
Cu2p3 M	2.41
Mo3d5 Oxide	0.35
Ni2p3 Ni(OH) ₂	1.03
Ni2p3 NiO	2.22
O1s C=O/C-O/OH	26.62
O1s Metal Oxide	7.96
Si2p Element	2.74
Si2p Oxide	9.08

元素相对含量/Atomic %

元素	含量/%
C	43.35
Cu	6.66
Mo	0.35
Ni	3.25
O	34.58
Si	11.82

● XPS应用介绍

XPS应用方向

表面分析技术广泛地应用于各行各业

玻璃行业

- 抗菌镀层
- 变色玻璃
- 防刮花涂层

能源电池

- OLEDs
- 燃料电池

表面改性

- 表面亲水/疏水改性
- 涂层缺陷

钢铁行业

- 耐摩擦表面
- 表面防腐蚀

航空航天

- 碳纤维改性
- 合金涂层工艺

生物医药

- 医学器件植入
- 隐形眼镜

纳米器件

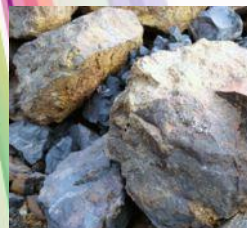
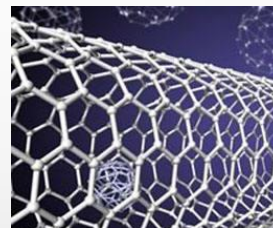
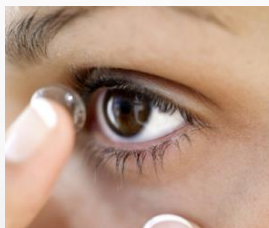
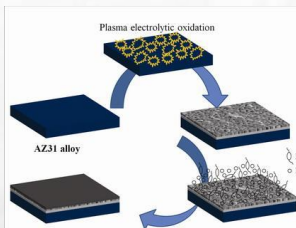
- 自组装单分子膜
- 超薄薄膜沉积

半导体

- 电极材料
- 晶片超薄薄膜
- 触摸屏
- 集成电路

地矿行业

- 矿物沉积岩
- 矿物晶体结构



案例1: XPS用于等离子体表面改性样品的评估分析

① 等离子体表面改性样品的表面评估分析问题

等离子体表面处理手段逐渐成为表面改性的常用手段，可以改进一系列材料的亲水/疏水性能。由于是在表面改性，就给评估表面改性效果、研究等离子表面改性机理、评估表面材料改性深度等方面带来难题

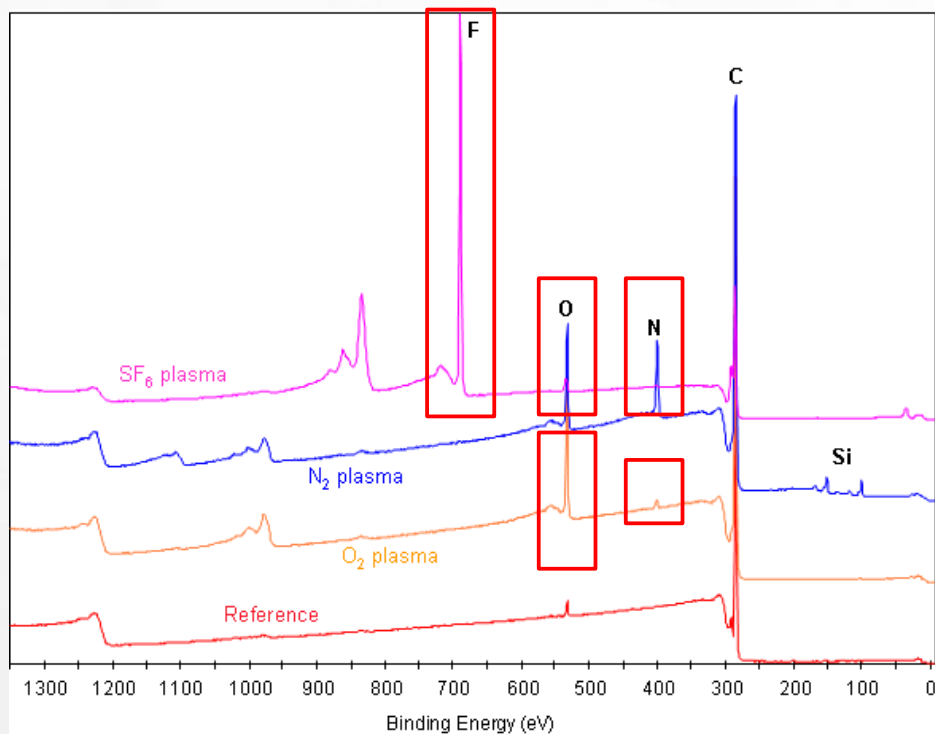
② XPS能解决等离子体表面改性样品研究过程中的什么问题

- 常规XPS可以评估等离子体表面改性聚合物涂层的效果及其机理
- 深度剖析-角分辨XPS来研究等离子改性结果及表面改性深度



XPS用于等离子体表面改性聚苯乙烯材料 (PS) 的分析

XPS 全谱扫描 —— 样品表面元素定性、定量分析



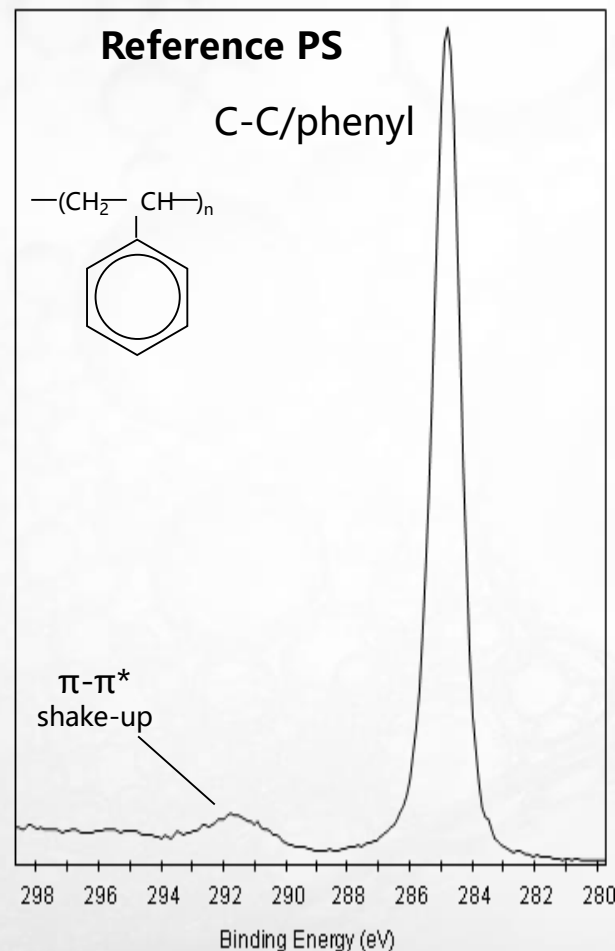
等离子体改性聚苯乙烯样品全谱分析可得到如下信息:

- O₂ 等离子体改性样品主要混入O以及少量的N元素
- N₂ 等离子体改性样品混入差不多等量的N、O元素;
- SF₆ 等离子体改性样品形成了强氟化的表面

Element	Surface concentration (at%)			
	Reference PS	O ₂ plasma	N ₂ plasma	SF ₆ plasma
Si	-	(tr)	1.14	-
C	99.61	87.85	76.91	59.37
N	-	(tr)	10.11	0.97
O	0.39	12.15	11.84	4.96
F	-	-	-	34.69

XPS用于等离子体表面改性聚苯乙烯材料(PS)的分析

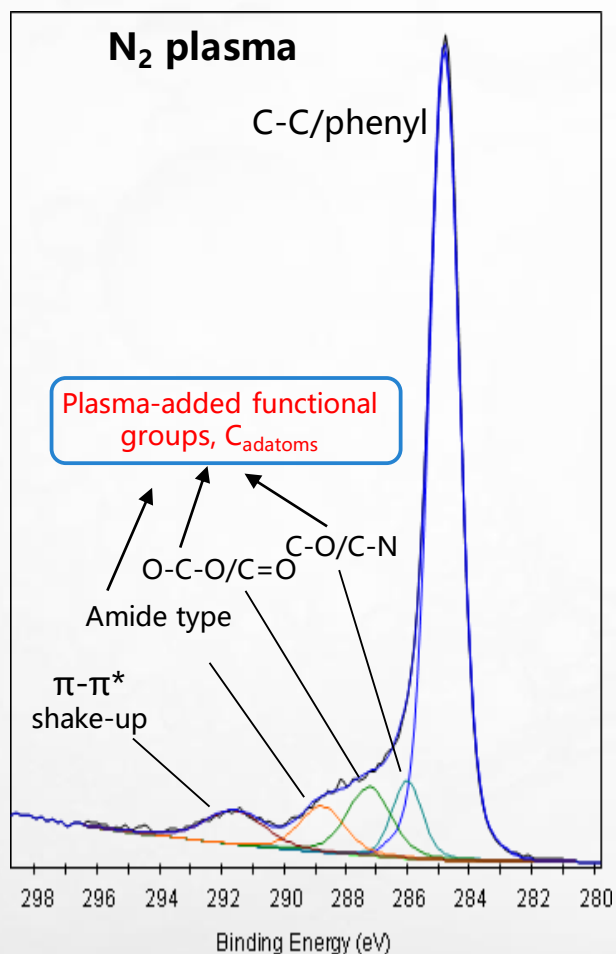
未改性PS样品高分辨窄扫C谱图分析



- 主峰的信号来自聚合物主链和苯环
- 聚苯乙烯的C1s 峰包含来自苯环的 $\pi-\pi^*$ 卫星峰
 - 没有C-C键在这里产生的震激峰
 - $\pi-\pi^*$ 震激峰的存在乃表明未饱和
 - 震激峰的所占比重约为主峰的 9%

XPS用于等离子体表面改性聚苯乙烯材料(PS)的分析

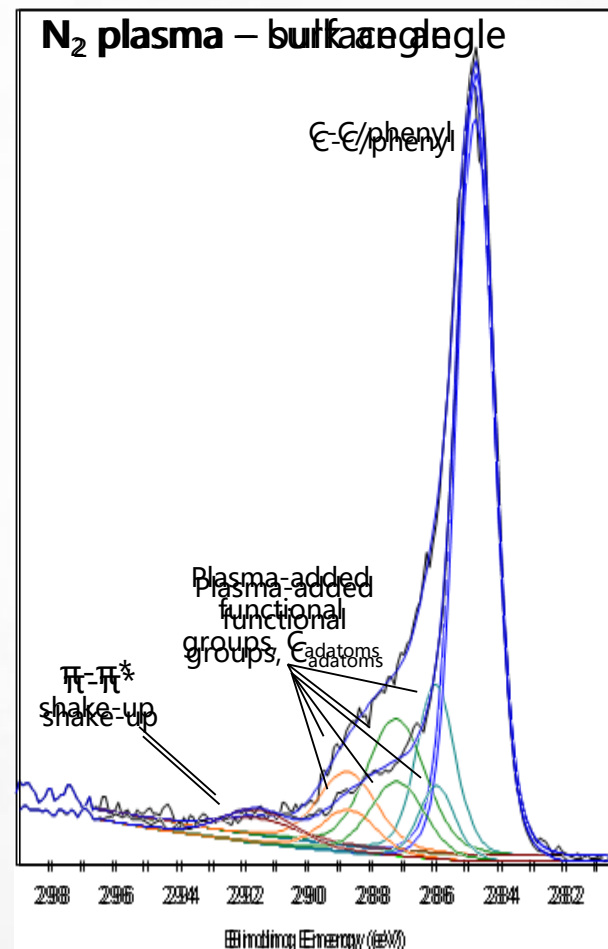
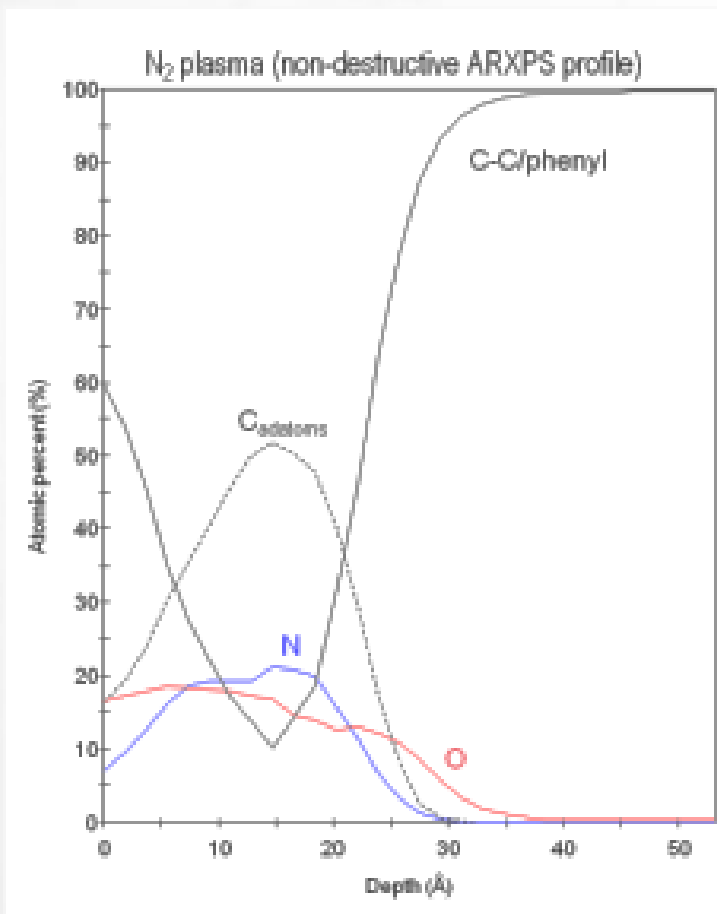
N₂等离子体改性PS样品高分辨窄扫C谱图分析



- 与未改性PS样品谱图相比, C谱图中出现新的变化, 代表有新的价态出现
- 进一步价态分析可得出N₂等离子体改性后, 在样品表面引入新的极性官能团, 进而使样品具有了亲水性

XPS用于等离子体表面改性聚苯乙烯材料 (PS) 的分析

N₂等离子体改性PS样品的深度剖析——角分辨XPS



- 角分辨数据可看出在约5.5nm的深度以后基本都是未被改性PS，改性添加官能团主要分布在样品表面约3nm深度以内
 - 使用角分辨XPS更直观的研究等离子改性结果及改性深度
- N₂ 等离子体改性PS样品体相
 - 探测深度 ~5.5 nm
 - 显著的 π - π^* 震激峰强度
- N₂ 等离子体改性PS样品表面
 - 探测深度 ~3 nm
 - 等离子体结合的成分的比重开始增加
 - 在表面有更多的 C=O, C-N, C-O 等信号
 - π - π^* 震激卫星峰信号比较弱
 - 表面未被改性的苯环较少

等离子体表面改性聚苯乙烯材料(PS)的分析

• 问题

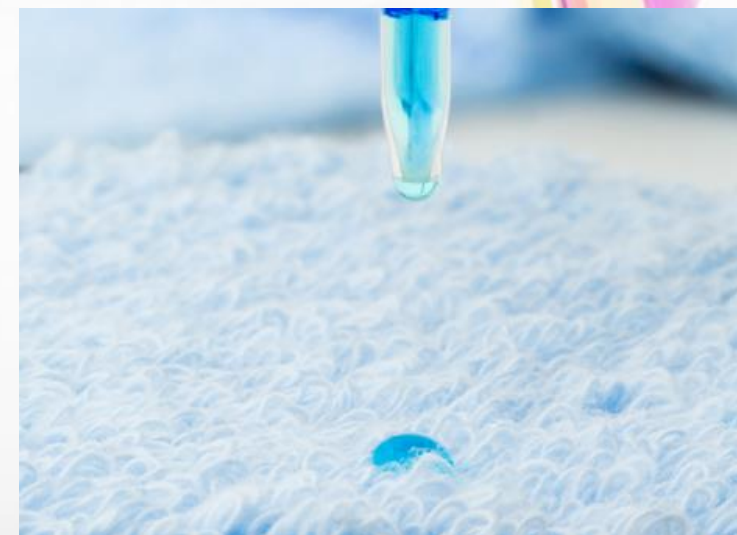
- 最新等离子表面处理手段，可以改进一系列材料表面的亲水/疏水性能，如何对表面改性效果进行评估是一个难题

• 解决方案

- XPS测试评估这种聚合物涂层的效果及其机理
- 深度剖析-角分辨XPS更彻底地研究等离子改性结果及深度

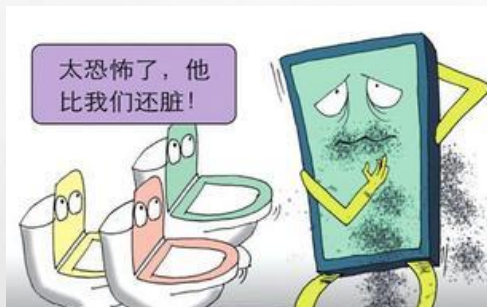
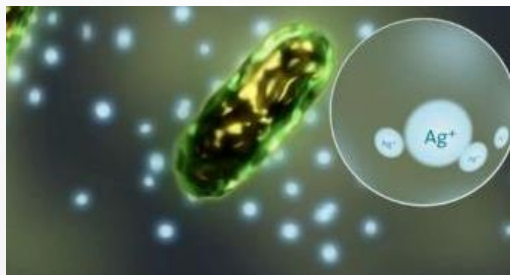
• 总结

- 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 官能团
- 改性只局域在最表面的2.5 nm – 3 nm深度范围内



*M. Haidopoulos, M. Horgnies, F. Mirabella, J.-J. Pireaux, Plasma Process. Polym. 2008, 5, 67–75

案例2: XPS用于抗菌玻璃表面的分析表征



■ 玻璃表面改性

- 为玻璃材料表面添加各种新型的功能
 - Ag离子表面，永久抗菌、灭菌性能
 - 防指纹、防污附加层
 - 增透、防蓝光、防辐射附加层
- 实际问题
 - 开发设计抗菌玻璃配方，控制工艺成本难题
 - 解决离子浓度与光学色度变化的难题
 - 评估不同工艺离子扩散深度难题
 - 抗菌玻璃老化机理的研究难题
- 赛默飞XPS解决方案
 - **XPS常规检测**鉴定表面元素组成及其化学态
 - **面内扫描**检测交换离子浓度均匀性
 - **深度剖析**检测离子交换分布深度及抗菌玻璃老化行为分析

案例3：钢铁行业-钢铁钝化



■ 钢铁钝化

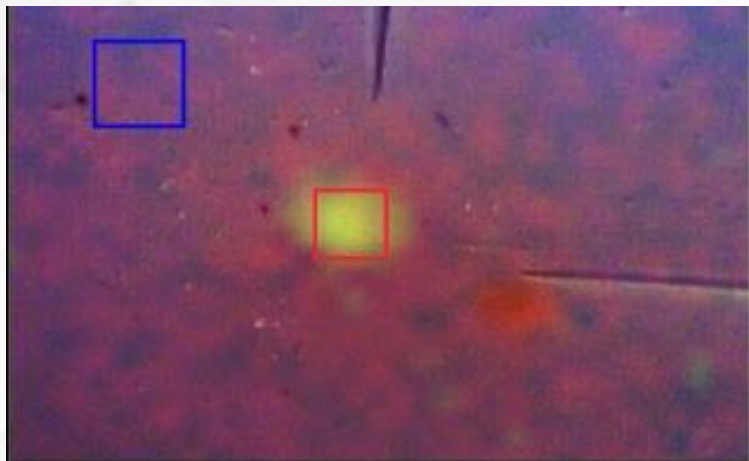
• 问题

- 不锈钢表面化学性能很大程度上受机械处理工艺的影响
- 钝化工艺以形成富含Cr的抗腐蚀层
- 评估某种钢铁钝化手段的耐腐蚀性能

• 解决方案

- XPS常规测试
 - 表面Cr/Fe比例
 - 表面的Cr-O/Fe-O比例
 - 表面的Cr-O/Cr_{metal} 和 Fe-O/Fe_{metal}比例
 - 氧化物厚度
 - 深度剖析
- XPS是一种极佳的手段来测量这些参数信息

案例4：钢铁行业-钢铁表面的聚合物涂层缺陷



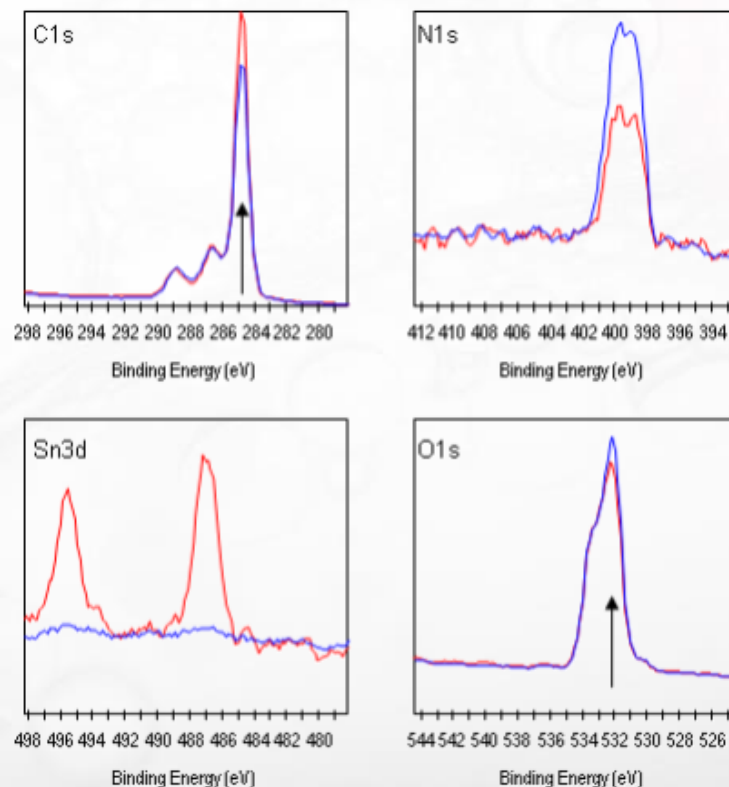
Overlay of XPS at% maps with optical image

■ 回溯成谱

- 缺陷和非缺陷区域对比
 - 每个图像像素点都有一套完整的XPS图谱

■ 回溯成谱

- 缺陷和非缺陷区域对比
 - 凹坑缺陷中心含锡
 - 凹坑中心的颗粒影响涂层化学
 - 标识区域的回溯成谱表明凹坑缺陷有比较多的C-C/C-H，比较少N和O



Spectroscopic data from indicated regions in XPS image



K-Alpha

高效能XPS测试能力

- 快速、直观的工作流程
- 交互式和完全自动化操作
- 互联网远程操控
- 内标自校准



Nexsa

小束斑XPS, 多技术集成

- 全聚焦: 10-400 μ m
- ISS、REELS、UPS、拉曼多技术联合
- 专利的快照成像
- MAGCIS双模式离子源
- 互联网远程操控
- 内标自校准



ESCALAB Xi+

完全拓展高性能表面分析平台

- 快速、定量平行成像
- 优于6 μ m束斑回溯成谱
- 优越的能量分辨率
- 标配REELS和ISS
- 可选配多种技术
AES/SEM/EDS/LEED/IPES/
EDXRF
- MAGCIS双模式离子源

更多信息.....

- Thermo XPS在线网站（介绍XPS系统、应用报告、网络讲堂以及在线数据库等信息）
- 英文版: <http://xpssimplified.com/>
- 中文版: <http://www.thermo.com.cn/xps>
- <http://www.thermofisher.com/cn/zh/home/industrial/spectroscopy-elemental-isotope-analysis/surface-analysis/xpssimplified.html>
- Thermo Advantage软件下载地址:
- <https://share.weiyun.com/f9e39d90a214d238b3f6e4f17c793a2a>
可以进行为期30天试用
- 分析过程中如有需要，可以访问赛默飞在线数据库或NIST数据库:
- <http://xpssimplified.com/periodictable.php>
- <http://www.lasurface.com/database/elementxps.php>
- <http://srdata.nist.gov/xps/selectEnergyType.aspx>

Thermo XPS在线网站中文版网站 ←-----→



谢谢！