

数理学院实验中心

数理学院实验中心于 2016 年 10 月成立。实验中心负责管理和运行数理学院大型公共平台仪器设备，目前拥有台式原位 X 射线吸收谱装置、X 射线衍射仪、X 射线光电子能谱仪、显微共焦拉曼光谱仪、场发射扫描式电子显微镜、能量过滤-场发射透射电子显微镜、环境气氛球差校正透射电子显微镜、扫描探针显微镜、脉冲激光沉积设备（准分子激光器）、人工智能实验节点等对材料进行谱图采集、结构表征、样品制备、智能计算等大型设备。以上仪器设备对外开放，欢迎感兴趣的老师预约使用！

台式原位 X 射线吸收谱仪介绍



台式原位 X 射线吸收谱仪（RapidXAFS）特点：

- 宽的能量范围
4.5-15 keV，可扩展至 20 keV。目前可以进行 28 种元素的分析测试
- 最高光通量产品
光子通量高于 1000000 光子/秒/eV-2000000 光子/秒/eV，采谱效率数倍于其他产品；获得和同步辐射相近的数据质量
- 优异的稳定性
光源单色光强度稳定性优于 0.1%，重复采集能量漂移 < 50 meV
- 1% 探测极限
高光通量、优异的光路优化和极好的光源稳定性确保所测元素含量>1%时依

旧获得高质量 EXAFS 数据

应用实例：

■ 超高光通量，超低检测限
(低至0.3-0.5%)

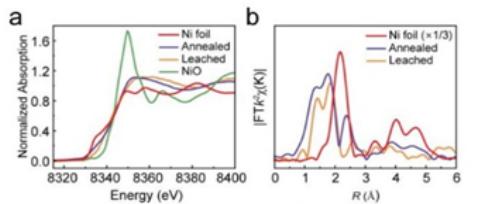
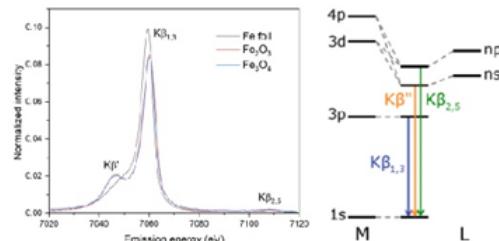


Fig. 4 (a) Ni K-edge XANES of the annealed and the leached residue carbon in comparison to Ni metal and NiO references, (b) FT-EXAFS spectra in the R space.

■ 发射谱模式 (精细电子结构)



最新成果：

- Wei, Z. et al. (2024) Quantum confinement-induced anti-electrooxidation of metallic nickel electrocatalysts for hydrogen oxidation. **Nature Energy**, **10**.1038/s41560-024-01604-9. (原位 HOR 反应 XAS)
- Xu, J. et al. (2024) Inhibition of halide oxidation and deprotonation of organic cations with dimethylammonium formate for air-processed p-i-n perovskite solar cells. **Nature Energy**, **9**, 536-547. (原位太阳能电池 XAS)
- Xu, J. et al. (2024) Lattice-sulfur-impregnated zero-valent iron crystals for long-term metal encapsulation. **Nature Sustainability**, **10**.1038/s41893-024-01409-4.
- He, X. et al. (2024) Revealing the degradation pathways of layered Li-rich oxide cathodes. **Nature Nanotechnology**, **10**.1038/s41565-024-01773-4. (原位锂离子正极 XAS)
- Luo, W. et al. (2024) Understanding the Role of Spin State in Cobalt Oxyhydroxides for Water Oxidation. **Angew Chem Int Ed**, **e202408005**. (原位 OER 反应 XAS)
- Zeng, L. et al. (2024) Invoking Interfacial Engineering Boosts Structural Stability Empowering Exceptional Cyclability of Ni-Rich Cathode. **Adv Mater**, **2405628**. (原位电池 XAS)

联系人：胡老师（理化楼 123）

手机：18810081763

邮箱联系：ustbxafs@163.com

X 射线衍射仪介绍

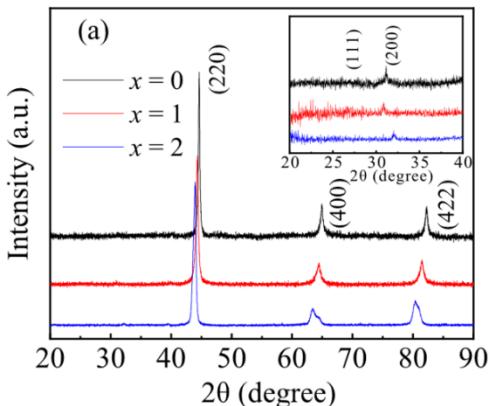
XRD (smartlab3) 特点:

- X 射线发生器
 - 最大输出功率 3kW
 - 最大管电压 60kV
 - 最大管电流 60mA
- 光管: Cu 靶
- 五轴样品台:
 - X 轴: -5°~95°
 - X 轴: -10mm~10mm
 - Y 轴: -10mm~10mm
 - Z 轴: -4mm~1mm
 - Φ 轴: +360 °

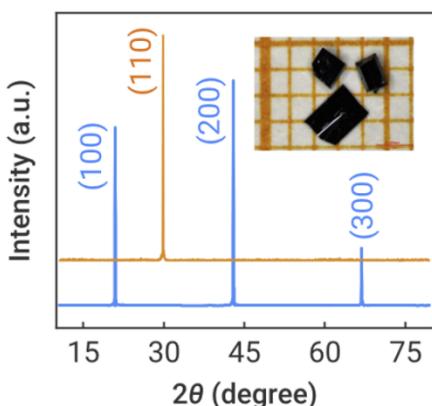


应用实例:

■ 多晶样品XRD表征



■ 单晶样品XRD表征



最新成果：

1. Wang, N. et al. (2023) Evolution of phase structure and magnetic property with Mn content and heat treatment in $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Ga}$ alloy. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 574: 170723.**
2. Li, Z, et al. (2023) Anomalous transport and metal to half-metal evolution induced by Cr doping in Co_2FeGa . **Physical Review B, 108(22): 224407.**
3. Li, Z, et al. (2024) Tuning the anomalous Hall effect of the high Curie temperature nodal-line metal Fe_3Ga via Mn doping and associated band topology. **Physical Review B, 110(10): 104407.**
4. Cheng, J. et al. (2024) Experimental investigation of intrinsic mechanism dominated anomalous Hall effect in hexagonal alloys $\text{Fe}_{3-x}\text{Mn}_x\text{Ge}$ ($x = 0.05, 0.1, 0.5$). **Journal of Alloys and Compounds, 1002: 175304.**
5. Song, J. et al. (2024) Comparison of two methods for achieving table-like magnetic entropy change in Eu-Ga-Ge clathrates. **Journal of Alloys and Compounds, 1005: 176110.**
6. Fu, X. et al. (2025) The magnetic property and anomalous Hall effect of polycrystalline Fe_3Sn . **Journal of Physics and Chemistry of Solids, 198: 112473.**

联系人：李老师 (理化楼 135)

手机：lgt065

邮箱联系：ligetian@ustb.edu.cn

X 射线光电子能谱仪介绍



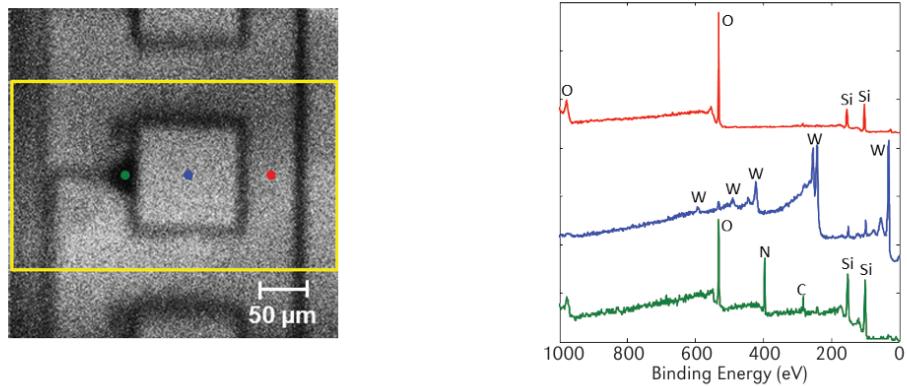
XPS(PHI5000 Versaprobe III)特点：

- 微聚焦扫描 X 射线束可应对从微区到大面积的分析需求（最小束斑 9 μm）
- 微区成像和图谱采集, 可同时高效对多个微区进行对比分析
- 氖离子溅射深度剖析, 可分析膜层结构和成分深度变化
- 设备配备紫外光源, 可做 UPS 价带谱, 测试样品功函数

- X 射线用于二次电子成像，XPS 成分影像的每个像素点可用于化学分析
- 配备的五轴全自动样品台，可做角分辨分析

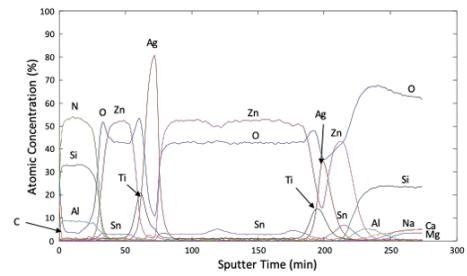
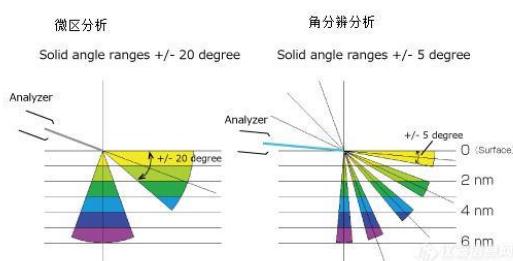
应用实例：

样品表面元素的微区分析（测试了紧邻位置的三个点，左边为测试位置的 X 射线成像及分析的位置信息，右边为对应的全谱）



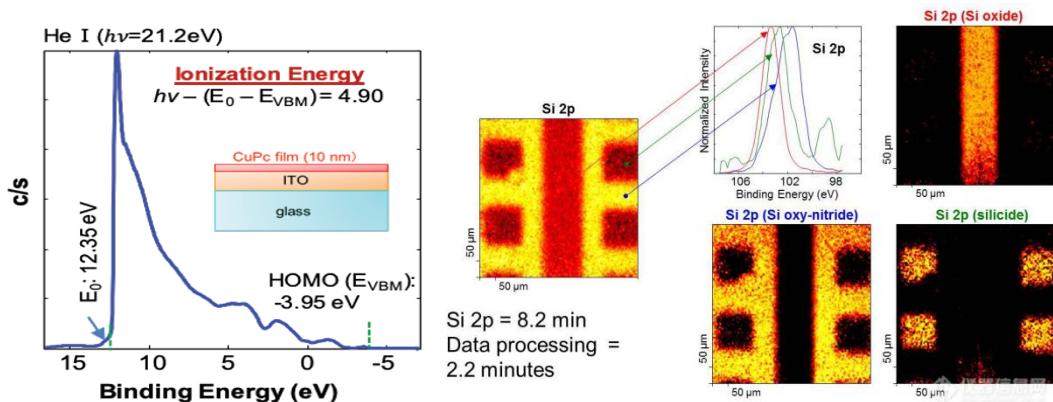
变角分析模式（角分辨）

玻璃基板多层薄膜样品深度分析



功函数的测量

元素二维成像测试（元素 mapping）



最新成果：

1. Yang, Y. et al. (2025) Vacancy and Dopant Co-Constructed Active Microregion in Ru–MoO₃–x/Mo₂AlB₂ for Enhanced Acidic Hydrogen Evolution. **Angew. Chem. Int. Ed. DOI: 10.1002/anie.202504084.**
2. Teng, X. et al. (2024) Enhanced alkaline hydrogen evolution reaction of MoO₂/Ni₃S₂ nanorod arrays by interface engineering. **Nano Energy 122, 109299.**
3. Wang, Z. et al. (2023) Amorphous K-Buserite Microspheres for High-Performance Aqueous Zn-Ion Batteries and Hybrid Supercapacitors. **Adv. Sci. 10, 2207329.**
4. Wang, Z. et al (2022) Aqueous Zn-ion batteries using amorphous Zn-buserite with high activity and stability. **Journal of Materials Chemistry A DOI: 10.1039/d2ta08676j.**
5. Zhu, L. et al (2024) Observations on Valence-Band Electronic Structure and Surface States of Bulk Insulators Based on Fast Stabilization Process of Sample Charging in UPS. **Laser Photonics Rev. 2301069.**
6. Wang, Z. et al (2023) Mitigating surface charging in XPS using an in-situ sub-nanometer gold coating technique. **Materials Characterization 196, 112663.**

联系人：阳老师（管庄校区绿创大科仪室）

手机：13717919521

邮箱联系：B1905018@ustb.edu.cn

共聚焦显微拉曼谱仪介绍

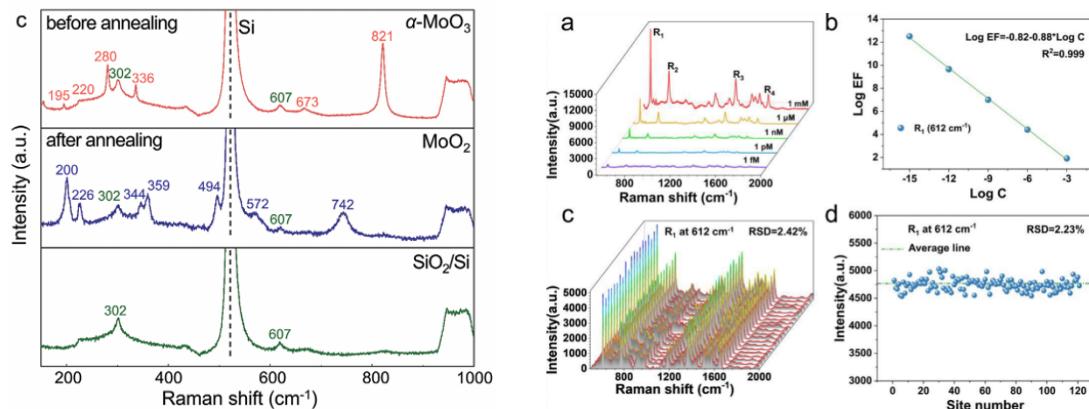


Raman (JY-HR800) 特点

- 长焦距谱仪，具有高谱能量分辨率，可实现最小1个波数的散射谱分辨率
- 共聚焦显微系统，可实现高空间分辨化学结构平面和深度成像
- 配有开放式显微系统，可方便加载多种环境，如电化学和电磁场等

应用实例：

■ $\alpha\text{-MoO}_3$ 退火前后的拉曼光谱 ■ 表面增强基底不同浓度 R6G 的拉曼光谱



最新成果：

1. He, Z. et al. (2023) Pseudocapacitance of Bimetallic Solid-Solution MXene for Supercapacitors with Enhanced Electrochemical Energy Storage, **Adv. Funct. Mater.** DOI10.1007/s11426-024-2430-7.
2. Zhang, Y. et al. (2024) First-principles study of an efficient non-noble metal single-atom catalyst Fe1/TiVCO₂ for CO oxidation, **Catalscitechnol**, 14, 1977-1990.
3. He, Z. et al. (2022) Two-Dimensional TiVC Solid-Solution MXene as Surface-Enhanced Raman Scattering Substrate, **ACS Nano**, 16(3): 4072-4083.
4. Li, T. C. et al. (2024) Controlled fabrication of metallic MoO₂ nanosheets towards high-performance p-type 2D transistors, **Small**, DOI10.1002/smll.202403118.

联系人：张老师（理化楼 139）

微信号：zhangxiaofang926

邮箱联系：xfzhang926@ustb.edu.cn

场发射扫描电子显微镜介绍

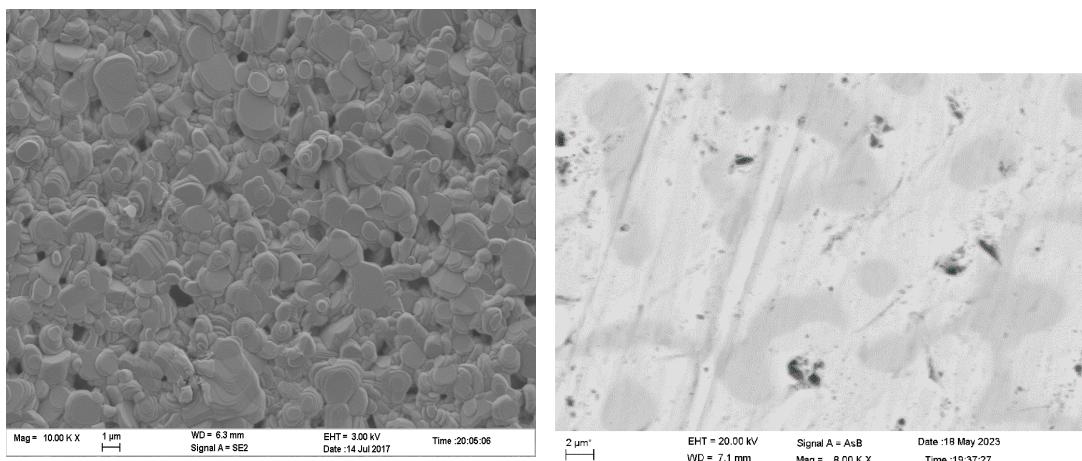


SEM (ZEISS SUPRA 55) 特点:

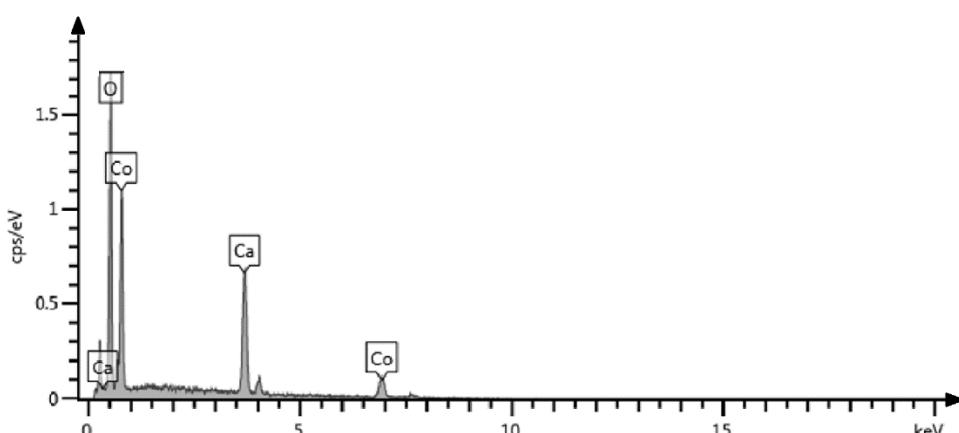
- 肖特基(Schottky)场发射电子源，具有较大的发射电流和极高的稳定性；与其他工艺相比，作为一种全新的成膜技术，它的生长参数独立可调
- 采用专利技术 GEMINI 镜筒，克服传统单极物镜光阑设计缺点，消除磁性影响，同时采用无交叉光路设计，提高了仪器的主要性能
- 采用专利技术 GEMINI 镜筒，克服传统单极物镜光阑设计缺点，消除磁性影响，同时采用无交叉光路设计，提高了仪器的主要性能
- 采用专利技术 GEMINI 镜筒，克服传统单极物镜光阑设计缺点，消除磁性影响，同时采用无交叉光路设计，提高了仪器的主要性能

应用实例:

■ 钴酸钙颗粒的二次电子显微照片 (1 万倍) ■ 一种 (TiVNb)0.9Ni0.1 合金样品的背散射电



钴酸钙样品的 X 射线能谱测量，曲线中仪器标注出了钙、钴和氧原子的特征谱



最新成果:

- Hou, Y. et al. (2024) A multifunctional oriented nanocrystalline $\text{Pb}_{0.91}\text{La}_{0.06}\text{Zr}_{0.8}\text{Ti}_{0.2}\text{O}_3$ relaxor ferroelectric thin film for chip power and thermal management. **J. Mater. Chem. C** **12**, 7956–7965.
- Zeng, H. et al. (2024) Bifunctional $\text{Bi}_{0.98}\text{Sm}_{0.02}\text{FeO}_3/\text{g-C}_3\text{N}_4$ Piezocatalyst for Simultaneous H_2 and H_2O_2 Production. **ACS Appl. Mater. Interfaces** **16**, 70566–70574.
- Zhang, M. et al. (2025) Differential regulation of primary carbides in high carbon bearing steel using pulsed current to improve corrosion resistance. **J. Mater. Res. Technol.** **35**, 6763–6777.
- Shi, G. et al. (2025) Enhancement of hydrogen storage and electrochemical performance in BCC alloys: The role of Cu, Pd, and Hf substitutions. **Int. J. Hydrog. Energy** **114**, 161–171.
- Tang, A. et al. (2024) Ligand-to-Metal Charge Transfer Motivated the Whole-Voltage-Range Anionic Redox in P_2 -Type Layered Oxide Cathodes. **Adv. Funct. Mater.** **34**, 2402639.
- Zhu, Q. et al. (2024) Triboelectrically active and wettability-switchable magnetic textile for self-powered intelligent marine conservation. **Chem. Eng. J.** **498**, 154739.

联系人：张老师（理化楼 138）

微信号：preston20

邮箱联系：zhangshiping@ustb.edu.cn

场发射透射电子显微镜介绍

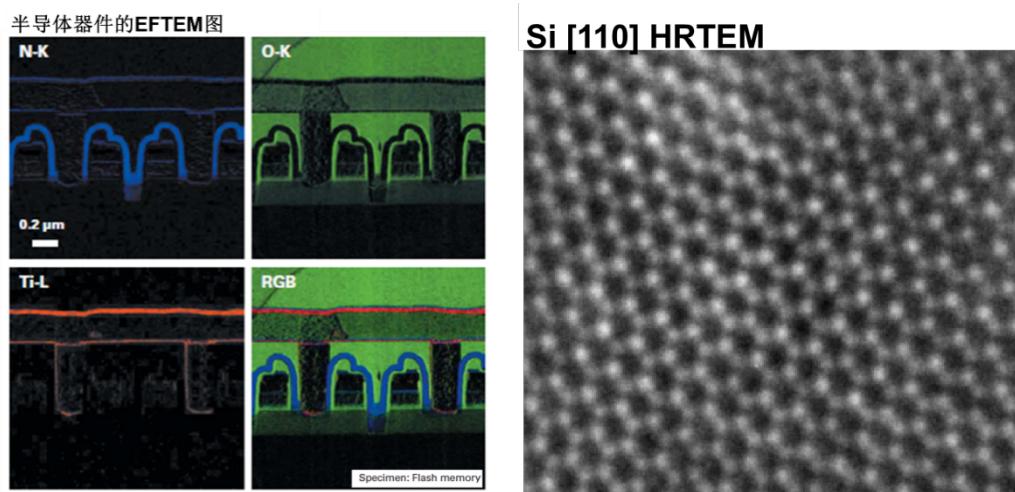


TEM(JEM-2200FS)特点

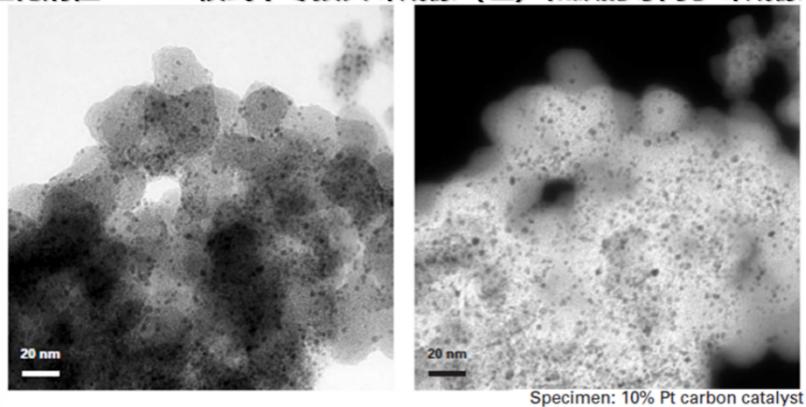
- 肖特基场发射电子枪
- 加速电压：200 kV
- 分辨率：点分辨率 0.23 nm
线分辨率 0.10 nm
信息极限 0.14 nm
STEM 分辨率 0.20 nm
能量分辨率 0.80 eV
- 放大倍数：TEM 50~1.2M
- STEM: 20K~150M 采用专利技术 GEMINI 镜筒

JEM-2200FS 是一台能量过滤型场发射透射电镜，配备了“Ω”型能量过滤器、STEM、HAADF、Ultrascan CCD 等附件，可以实现形貌观察、选区衍射、高分辨成像、原子序数衬度成像、能量过滤成像、电子能量损失谱测定等功能，具有高分辨率的结构表征和综合分析能力。

应用实例：



铂碳催化剂在EFTEM模式下零损失峰成像（左）和碳的等离子峰成像（右）



最新成果：

1. Zhang, Y. et al. (2024) Ce-Doping Rather Than CeO₂ Modification and Their Synergistic Effect: Promotion from Ce Species in the Electrocatalytic Oxidation of 5-Hydroxymethylfurfural Over NiFe-LDH, **Advance Energy Materials**, **14**, 2401449.
2. Liu, Y. et al. (2024) Synergistic integration of PdCu alloy on TiO₂ for efficient photocatalytic CO₂ reduction to CH₄ with H₂O, **Journal of Materials Chemistry A**, **12**, 23577-23589.
3. Pan, H. et al. (2024) CeO₂-regulated NiCoOOH formed via electrocatalytic self-reconstruction of NiCoCe MOFs for efficient electro-oxidation of 5-hydroxymethylfurfural, **Journal of Materials Chemistry A**, **12**, 2955.

4. Zhao, G. et al. (2023) Electrochemical Oxidation of 5-Hydroxymethylfurfural on CeO₂-Modified Co₃O₄ with Regulated Intermediate Adsorption and Promoted Charge Transfer, **Advanced Functional Materials, 33(14) 2213170.**
5. Zhao, D. et al. (2025) Reverse modulation of defect density of Ce-MOF-808 by solvent-assisted ligand exchange for dicyclopentadiene hydrogenation, **Sci. China Chem.**
6. Wang, K. et al. (2024) Preparation and Characterization of Ni-Mn-Ga-Cu Shape Memory Alloy with Micron-Scale Pores, **Metals, 14, 1155.**

联系人: 朱老师 (理化楼 125)

手机: 18810547881

邮箱联系: zyc930502@outlook.com

环境气氛球差校正电子显微镜介绍

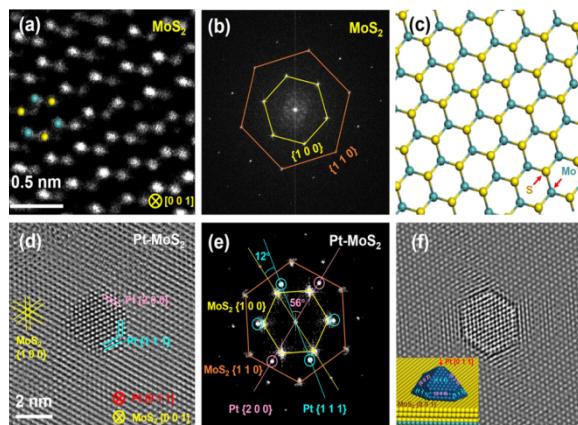


Titan ETEM 特点:

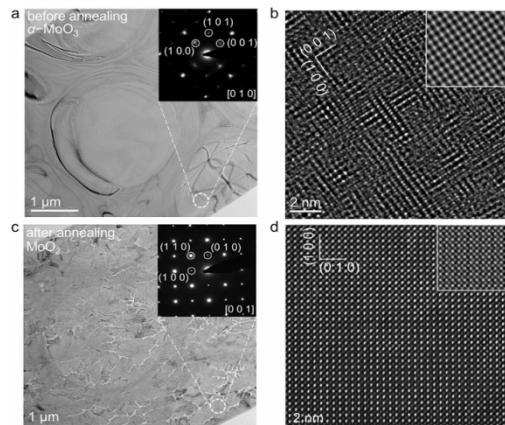
- 肖特基场发射电子枪
- 加速电压: 80-300 kV
- 分辨率:
 - EELS 分辨率: 0.7 eV
 - EDX 分辨率: 131 eV
 - 标准模式
 - 点分辨率: 0.10 nm
 - 线分辨率: 0.10 nm
 - STEM 分辨率: 0.14 nm
 - 环境模式 (10^{-3} Pa ~ 2000Pa)
 - 点分辨率: 0.12 nm
 - 信息分辨率: 0.12 nm
 - STEM 分辨率: 0.16 nm

应用实例:

■ MoS₂ 和 Pt-MoS₂ 的 TEM 表征



■ α -MoO₃ 薄片退火前后的 TEM 表征



最新成果:

1. Wang, P. et al. (2024) Efficient conversion of syngas to linear α -olefins by phase-pure χ -Fe₅C₂, **Nature**, **635**, 103.
2. Yan, W. X. et al. (2024) Atomic-Scale Robust Modulation of Pt on Monolayer MoS₂ for Enhanced on-Chip Hydrogen Evolution Reaction, **Adv. Funct. Mater.**, DOI10.1002/adfm.202423262.
3. Teng, X. A. et al. (2024) Enhanced alkaline hydrogen evolution reaction of MoO₂/Ni₃S₂ nanorod arrays by interface engineering, **Nano Energy**, DOI10.1016/j.nanoen.2024.109299.

4. Zhu, Y. C. et al. (2024) Atomic scale in-situ observation of gas-solid interaction regulating the pre-nucleation process of Pd atomic clusters, **Nano Today**, DOI10.1016/j.nantod.2024.102533.
5. Li, T. C. et al. (2024) Controlled fabrication of metallic MoO₂ nanosheets towards high-performance p-type 2D transistors, **Small**, DOI10.1002/smll.202403118.
6. Ye, H. Y. et al. (2023) Nucleation and growth of nanocrystals investigated by in situ transmission electron microscopy, **Small**, DOI10.1002/smll.202303872.
7. Zhang, Y. et al. (2023) Synthesis of FeOOH scaly hollow tubes based on Cu₂O wire templates toward high-efficiency oxygen evolution reaction, **Rare Metals**, DOI10.1007/s12598-023-02284-2.

联系人：张老师（理化楼 140）

微信号：zhangxiaofang926

邮箱联系：xfzhang926@ustb.edu.cn

扫描探针显微镜介绍



扫描探针显微镜（AFM）特点：

布鲁克（Bruker）的 Dimension ICON 扫描探针显微镜（SPM）是一款高性能原子力显微镜（AFM），广泛应用于纳米尺度材料表征和表面分析。其核心特点总结如下：

1. 多模式成像与定量测量

PeakForce Tapping® 技术：核心创新技术，可在纳米尺度下实现 实时定量力学性能测量（如形变等），同时减少探针和样品损伤，适用于软硬材料（如生物样品、聚合物、半导体等）。

多种操作模式：支持接触模式、轻敲模式、导电 AFM（C-AFM）、磁力显微镜（MFM）、压电力显微镜（PFM）等，满足电学、磁学、力学等多维度表征需求。

2. 高分辨率与高速扫描

FastScan™ 技术：高速扫描能力（比传统 AFM 快 10 倍以上），在保持亚纳米级分辨率的同时快速获取大范围图像，适用于动态过程研究。

闭环扫描系统：采用闭环反馈控制，消除热漂移和扫描器非线性误差，提升图像精度和重复性。

3. 环境灵活性与样品兼容性

多环境适配：支持空气、液体（液相池），可研究材料在溶液中的实时行为或高温/低温下的特性。

大样品容量：最大支持直径 200 mm 的样品（如完整硅片），兼容工业标准，适合半导体、材料科学等领域的量产分析。

4. 智能化与易用性

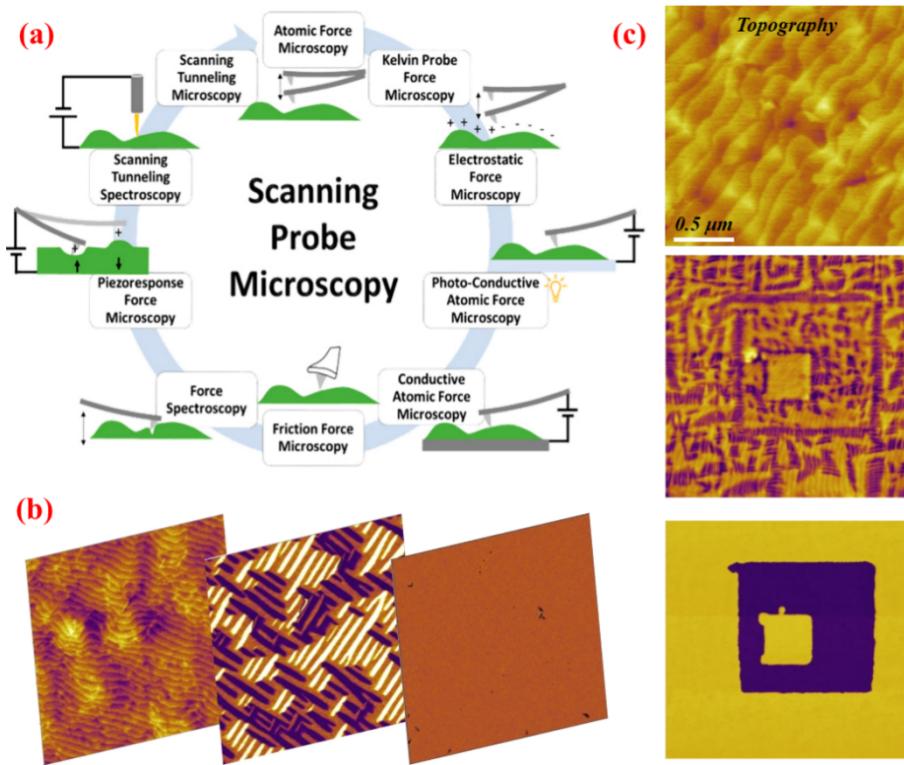
自动化功能：集成自动激光校准、探针更换、样品定位（SmartAlign®），简化操作流程，减少人为误差。

NanoScope® 软件平台：提供直观的用户界面和强大的分析工具（如 3D 形貌重建、粗糙度分析、力学图谱处理），支持一键生成定量报告。

5. 工业级可靠性与扩展性

抗干扰设计：主动隔震系统和声学屏蔽技术，确保在复杂实验室环境中的稳定运行。

应用实例：



扫描探针显微镜（SPM）是一类基于探针与样品间局域相互作用实现纳米尺度成像和测量的仪器（a）。使用 AFM 模式获取的 BaTiO₃ 外延薄膜的表面形貌，图像显示薄膜呈现出台阶状生长特征且表面原子级别平整（b）。使用 PFM 模式获取 PbTiO₃ 外延薄膜的表面形貌和畴结构（c）。

最新成果：

1. Yang, Q. et al. (2023) Ferroelectricity in layered bismuth oxide down to 1 nanometer. **Science 379, 1218-1224.**
2. Zhang, T. et al. (2024) Superior Energy Storage Performance in Antiferroelectric Epitaxial Thin Films via Structural Heterogeneity and Orientation Control. **Adv. Funct. Mater., 34, 2311160.**

联系人：张老师（理化楼 137）

微信号：tfzhang-USTB

邮箱联系：tfzhang@ustb.edu.cn

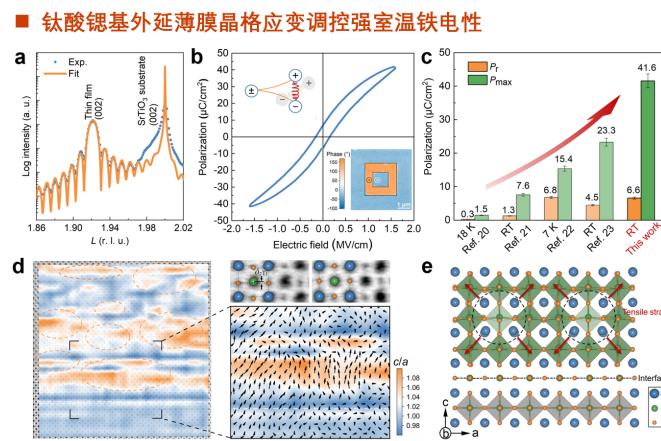
PLD 脉冲激光溅射沉积系统介绍



PLD (PLD-4508 型) 特点

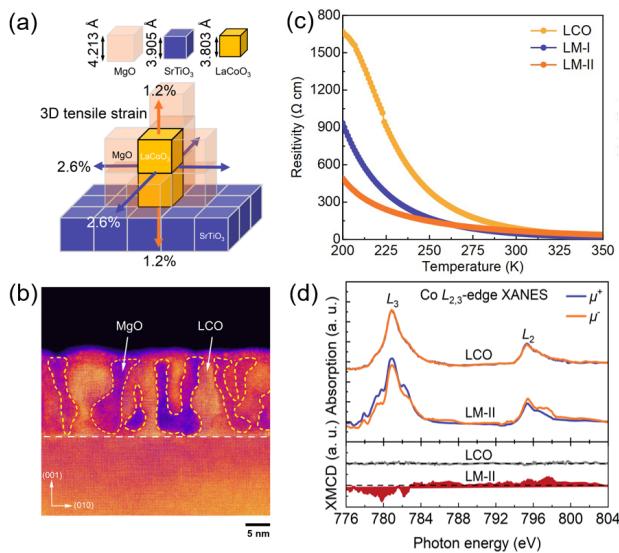
- 宽的工作压力的动态范围
 10^{-10} Torr ~ 100 Torr
- 与其他工艺相比，作为一种全新的成膜技术，它的生长参数独立可调，并可精确控制化学计量比，从而易于实现超薄薄膜的生长和多层膜的制备，生长的薄膜结晶性能较好，膜的平整度也较高。
- 除非是极少数对该种激光而言是透明的材料，几乎所有的材料都可用 PLD 法制膜，可见 PLD 法可制膜种类之多。
- PLD 技术的成膜效率高，能够进行批量生产。

应用实例：



SrTiO₃基同质外延薄膜同步辐射面外 XRD 图谱 (a)；薄膜室温电滞回线及 PFM 图像 (b)；SrTiO₃基薄膜铁电性对比 (c)；原子分辨 ABF-STEM 图像及原子极性位移分布 (d)；SrTiO₃基同质外延薄膜局域 Ti/O 空位晶格应变调控示意图 (e)

■ 自组装纳米复合相薄膜制备与新颖三轴晶格应变调控



LaCoO₃:MgO 自组装纳米复合薄膜三轴拉伸应变调控示意图 (a); 薄膜 HAADF -STEM 图像 (b); 电阻-温度曲线 (c); 薄膜室温 XMCD 磁圆二色谱 (d)

最新成果:

- Li, T. et al. (2023) High-temperature Ferroic Glassy States in SrTiO₃-based Thin Films. **Phys. Rev. Lett.** **131**, 246801.
- Li, T. et al. (2025) Room-temperature Perovskite Ferromagnetic Insulator via Three-dimensional Tensile Strain. **Phys. Rev. Lett.** **134**, 016702.
- Chen, J. et al. (2024) Ultrahigh-efficiency Superior Energy Storage in Lead-free film with a Simple Composition. **J. Am. Chem. Soc.** **146**, 1926-1934.
- Huo C. et al. (2023) Colossal ionic conductivity in interphase strain-engineered nanocomposite films. **J. Am. Chem. Soc.** **145**, 13623-13631.
- Qi H. et al. (2024) Superfine Nanodomain Engineering Unleashing Ferroelectricity in Incipient Ferroelectrics. **J. Am. Chem. Soc.** **146**, 20205-20212.
- Li, T. et al. (2021) Strong Room-temperature Ferroelectricity in Strained SrTiO₃ Homoepitaxial Film. **Adv. Mater.** **33**, 2008316.
- Zhou, X. et al. (2024) Revealing the role of high-valence elementary substitution in the hydrogen-induced Mottronics transitions of vanadium dioxide. **Appl. Phys. Lett.** **124**, 082103.
- Zhou, X. et al. (2023) Multiple Electronic Phase Transitions of NiO via Manipulating the NiO₆ Octahedron and Valence Control. **Adv. Funct. Mater.** **33**, 2303416.
- Yan, F. et al. (2022) Frequency Regulation in Alternating Current Transportation Properties for Electron Correlated Rare-Earth Nickelates Heterostructures. **J. Appl. Phys.** **131**, 075109.
- Zhou, X. et al. (2022) Revealing the Role of Hydrogen in Electron-Doping Mottronics for Strongly Correlated Vanadium Dioxide. **J. Phys. Chem. Lett.** **13**, 8078.

联系人: 张老师 (理化楼 123)

手机: zhangbo486947

邮箱联系: zhangbo6771@126.com

人工智能实验节点（CPU、GPU）介绍

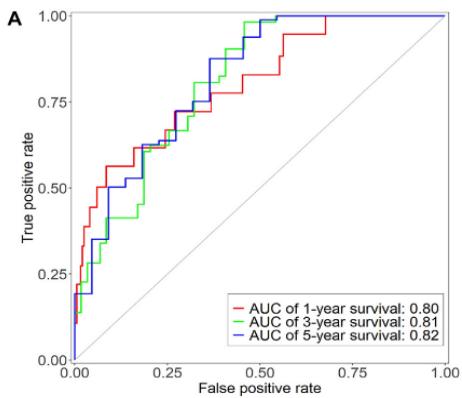


设备(型号)特点:

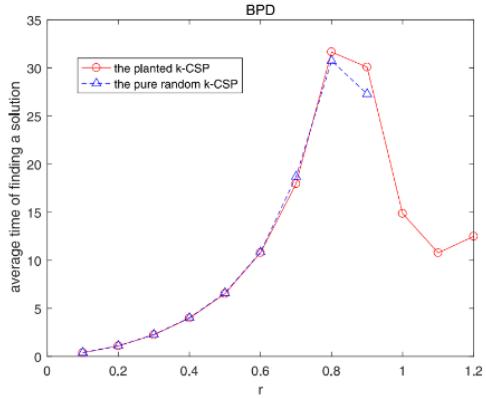
- GPU A100-40GB 12 张,
- GPU V100-16GB 8 张,
- GPU 2080 Ti-11GB 20 张,
- 共有计算节点 10 个, CPU 核心 368 个, 总内存 2048G, 总存储空间 20T, 总计算能力 216.3 TFlops, 内部万兆、外部千兆网络
- 安装软件有 Python, R, ansys, comsol, lammps, vasp, matlab 等
- 校内平台地址 222.28.41.254:100, 校外可通过 Pulse Secure 登录。

应用实例:

生物信息学中的计算问题



优化问题中的计算问题



最新成果:

1. Liu J., et al (2023). Value iteration for streaming data on a continuous space with gradient method in an RKHS. **Neural Networks, 166, 437-445.**
2. Ai D., et al (2023). Tumor tissue microorganisms are closely associated with tumor immune subtypes. **Computers in Biology and Medicine, 157, 106774.**
3. Liu J., et al (2023). Properties of Standard and Sketched Kernel Fisher Discriminant. **IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 45(8), 10596-10602.**
4. Xu W., et al (2023). Generating hard satisfiable instances by planting into random constraint satisfaction problem model with growing constraint scope length. **Physica A, 609, 128367.**

联系人: 徐老师 (理学楼 107)

手机: xuwei_203

邮箱联系: xuwei_225@163.com