

高能同步辐射光源高压线站功能概述*

张飞¹, 董伟伟¹, 杨栋亮¹, 宫宇¹, 李延春¹,

蒋佳月^{1,2}, 王宇双^{1,2}, 李晓东¹

(1. 中国科学院高能物理研究所, 北京 100049;

2. 中国科学院大学, 北京 100049)

摘要: 高能同步辐射光源高压线站是一条利用微/纳米尺寸光斑, 结合金刚石对顶砧高压技术, 以 X 射线衍/散射方法为主开展极端环境下物质结构表征研究的线站。高压线站配置了真空内波荡器插入件和液氮冷却的 Si(111)/Si(220)双晶单色器, 可提供 20~75 keV 范围的单色光。针对微米和亚微米尺度实验需求, 线站分别采用组合折射透镜和先进的 Kirkpatrick-Baez 镜聚焦光学方案。得益于第四代同步辐射光源的低发射度、高亮度以及高相干性特点, 可在相应样品点处分别实现优于 5 μm 和 200 nm 的光斑, 最高光子通量超过 1×10^{13} phs/s。根据实验方法和聚焦技术的不同, 实验站设置了通用实验平台、激光加热平台以及亚微米实验平台。同时, 在通用实验平台配备了低温、电阻加热以及快速加载等环境装置, 可为用户提供粉末(多晶)、单晶、径向 X 射线衍射以及原子对分布函数等原位结构表征实验方法。本文将重点介绍线站的主要性能与实验方法, 并通过展示多种实验方法的应用实例, 帮助科研人员深入了解线站的功能。最后, 对线站后续的实验方法发展提出展望, 期望本线站将来能在多学科研究中得到广泛应用, 助力中国高压科学与技术的发展。

关键词: 同步辐射光源; 高压线站; 金刚石对顶砧; X 射线衍射

中图分类号: O434.19; O521.3

文献标识码: A

压力, 作为物理学中重要的热力学参量之一, 可以有效缩短原子间距, 增加相邻电子轨道的重叠, 从而改变物质的晶体结构、电子能带结构和原子(分子)间相互作用, 并诱导新的物理现象和物性。为理解高压下这些新现象和新物性的起源, 有必要对不同压力下物质的结构演化进行表征研究。在过去几十年, 借助金刚石的高硬度、良好透光性、化学稳定性以及低 X 射线吸收特点, 科学家们利用金刚石对顶砧压机(Diamond Anvil Cell, DAC)开展高压下的科学研究^[1], 已在凝聚态物理、化学、材料科学以及地球科学等众多领域取得了丰硕的成果^[2-4]。此外, 将 DAC 与低温恒温器^[5]、电阻加热炉^[6-8]、激光加热^[9-11]以及动态加载^[12-15]等样品环境设备耦合, 进一步拓展了物质科学的研究空间, 促进了极端条件下新物理现象的揭示、新材料性能的探索以及地球和行星内部物质状态和演化过程的研究。

由于 DAC 中金刚石压砧、垫块和封垫等组件对样品空间及实验几何构成不同程度的物理约束, 探测手段需兼具高穿透力、微米乃至纳米级空间分辨率和良好的背景抑制能力, 才能准确获取样品在高压下的结构信息。同步辐射光源凭借其宽能量范围、高通量、高准直、时间结构以及相干性等优势, 在高压科学研究中发挥了重要作用。自 20 世纪 80 年代以来, 同步辐射 X 射线衍/散射、谱学以及成像技术与 DAC 技术的不断融合, 极大丰富了高压下物质结构表征的手段^[16]。其中, 同步辐射高压 X 射线衍射(X-ray Diffraction, XRD)技术尤为成熟, 该技术不仅可以解析晶体材料的长程有序和非晶材料的短程局域结构, 还可获得物质的缺陷、应力应变以及择优取向等物性信息^[17]。

*收稿日期: 2026-08-01; 修回日期: 2026-10-01

基金项目: 高能同步辐射光源国家重大科技基础设施项目(发改高技(2017)2173号)

作者简介: 张飞(1990—), 男, 博士, 副研究员, 主要从事同步辐射高压实验技术与应用研究. E-mail: fzhang@ihep.ac.cn.

通讯作者: 李晓东(1975—), 男, 博士, 研究员, 主要从事同步辐射高压实验技术与应用研究. E-mail: lixd@ihep.ac.cn.

目前,国内外多个同步辐射光源大多建有以 XRD 为主的专用高压线站,如美国 APS 的 GSECARS^[18]和 HPCAT^[19]系列线站、美国 ALS 的 12.2.2^[20]线站、法国 ESRF 的 ID27^[21]和 ID15B^[22]线站、德国 PETRA III 的 P02.2^[23]线站、日本 SPring-8 的 BL10XU^[24]线站、巴西 Sirius 光源的 EMA^[25]线站以及我国上海光源的 15U1^[26]线站(兼用)和北京同步辐射装置 4W2^[17]线站(现已停止运行)等。

近年来,为获得更加优异的光束性能,国际主要高能同步辐射光源纷纷实施第四代升级,如法国 ESRF-EBS^[27]、美国 APS-U^[28]、德国 PETRA IV^[29]和日本 SPring-8-II^[30],已相继完成或正推进衍射极限环改造。我国高能同步辐射光源(High Energy Photon Source, HEPS)作为亚洲第一台基于电子储存环的第四代同步辐射光源,于 2019 年 6 月开工建设,2025 年 12 月进入试运行。HEPS 能够为光束线站提供光斑更小、亮度更高且相干性更好的 X 射线探针^[31],为在更高压力范围、更小时间或空间尺度等条件下的科学研究提供重要支撑。HEPS 一期建设中包含了一条针对 DAC 高压科学研究的专用线站^[32, 33]。该线站通过优化聚焦光斑与样品台设计,配备了低温、电阻加热、激光加热以及快速加载等多种环境装置,可供用户开展高压粉末(多晶)、单晶、径向 XRD 以及原子对分布函数(Pair Distribution Function, PDF)等实验研究。同时,线站还预留了功能升级的空间,以兼容未来更加复杂的原位实验以及方法学研究需求。

作为国内首条基于第四代同步辐射光源的专用高压线站,经过多轮调试与优化迭代,目前已具备开展多种原位高压实验表征的能力,并能为用户提供友好的软件操作环境。本文将从三个方面对 HEPS 高压线站进行介绍:首先,简要介绍 HEPS 高压线站的光束线性能参数;其次,系统阐述实验站已具备的高压实验方法,并给出部分典型实验方法的初步测试结果;最后,基于线站现有的技术条件,将其与国际典型高能同步光源的高压线站进行对比分析,对线站后续的功能拓展及性能优化提出展望。本文旨在系统介绍 HEPS 高压线站的能力与发展潜力,为研究人员在高压线站开展实验研究工作提供参考。同时,诚挚期待用户对高压线站的功能设计、操作流程以及未来升级方向提出宝贵意见和建议,也热忱欢迎合作者们共同拓展线站的实验方法与应用能力,提升线站对高压科学研究的整体支撑水平。

1 HEPS ID31 高压线站

HEPS 高压线站从储存环 ID31 直线节引出,是以高压角分辨 XRD 实验方法为主的专用线站(以下简称 ID31 线站)。本线站为用户提供了宽能区、高通量以及多尺度的 X 射线探针,并配置了低温、高温以及动态加载等环境设备,以满足 DAC 高压条件下样品结构原位表征的实验需求。

1.1 光束线站简介

本线站针对高压研究中不同样品体系、实验方法以及原位环境的测试需求,兼顾光学系统的物理约束,对光源、光束线以及实验站进行了整体设计与优化。光源方面,选用以 SmCo 永磁材料为主体的真空内波荡器,可在 20~75 keV 的硬 X 射线能区内提供高通量和高亮度的光子束。光束线方面,设置了微米通用聚焦模式和亚微米聚焦模式,以满足不同实验对聚焦光斑的差异性需求。实验站方面,配置了三个实验平台,分别布置于通用实验棚屋和亚微米聚焦专用实验棚屋,以适应不同的实验方法和聚焦模式的需求。

光束线的整体布局如图 1 所示。插入件产生的白光(指宽能量带宽 X 射线)首先经白光光阑调节光束尺寸,随后由水平反射式伪切槽液氮冷却 Si(111)/Si(220)双晶单色器进行单色化。单色光束斑进一步经光阑限定尺寸,再由复合折射透镜(Compound Refractive Lenses, CRLs)或先进的 Kirkpatrick-Baez 镜(简称 K-B 镜)聚焦,在不同样品位置分别获得微米或亚微米尺寸的光斑,为 DAC 高压环境下的原位 X 射线衍/散射实验表征提供高品质光束^[33]。图 2 展示了利用 CRL 将能量为 30 keV 的 X 射线聚焦于样品位置 S1 处所获得的典型光斑尺寸。采用 CRL1 和 CRL2a 组合聚焦后,利用光电二极管扫描光斑的强度分布,并对所得强度数据的一阶导数进行高斯拟合,获得样品处水平和垂直方向的聚焦光斑尺寸分别约为 2.8 μm 和 2.4 μm 。尽管高压线站 X 射线的能量范围覆

盖 20~70 keV，但考虑到角分辨 XRD 实验不需要扫描能量，同时为兼顾线站稳定性与模式切换效率，实际使用中为不同实验平台优化设置了若干固定能量点。表 1 给出了 ID31 线站不同平台目前常用的能量、束斑尺寸以及光子通量等参数。

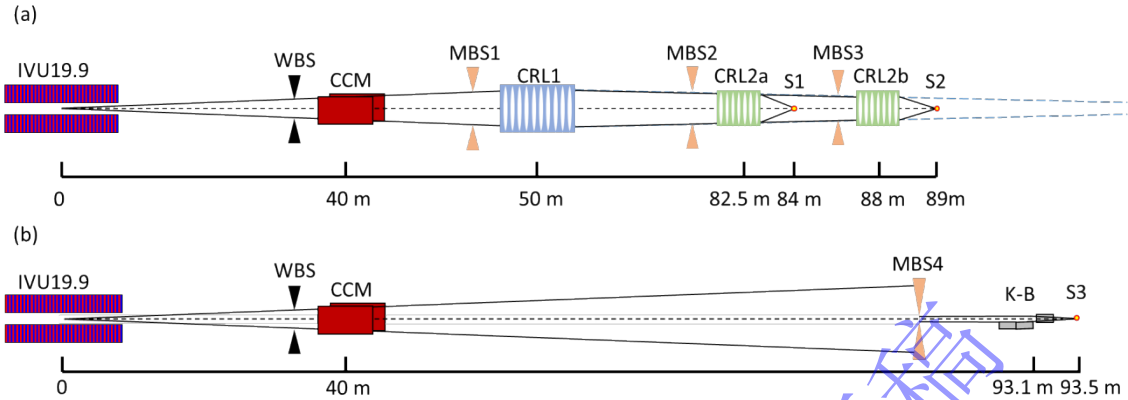


图 1 高压线站的光束线整体布局：(a) 通用聚焦模式，(b) 亚微米聚焦模式

(IVU: 真空中波荡器; WBS: 白光狭缝; MBS: 单色光狭缝; CCM: 切槽双晶单色器; CRL: 复合折射透镜; S1、S2 和 S3: 不同的样品位置; K-B: Kirkpatrick-Baez 镜)

Fig. 1 Optical layout of high-pressure beamline: (a) General focus mode, (b) Sub-micrometer focus mode

(IVU: In-Vacuum Undulator; WBS: White Beam Slits; MBS: Mono Beam slits; CCM: Channel-cut Monochromator; CRL: Compound Refractive Lens; S1, S2, and S3: different sample position; K-B: Kirkpatrick-Baez mirror)

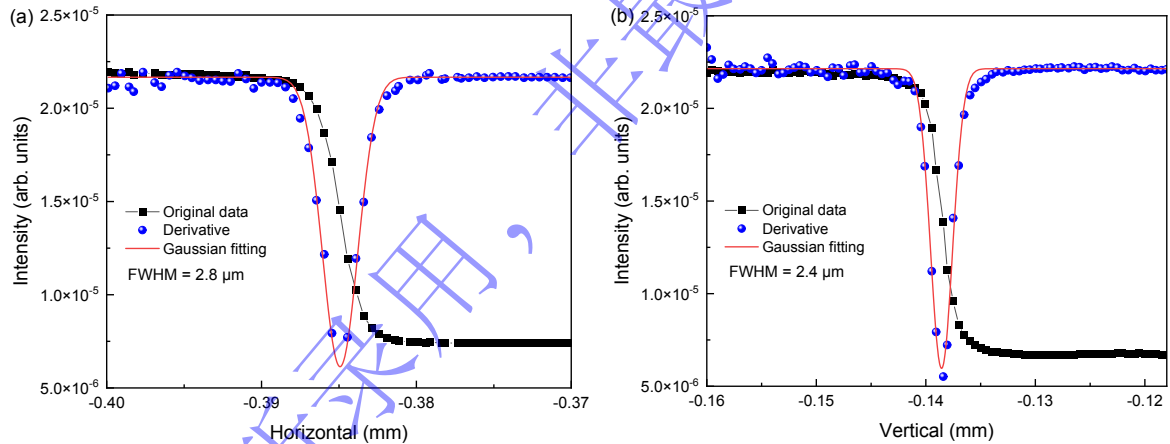


图 2 样品位置 S1 处使用的典型聚焦光斑尺寸：在 30 keV 能量下，利用 CRL 分别获得的水平(a)和竖直(b)方向聚焦光斑尺寸。图中黑色实心方块为实验测量强度数据，蓝色实心球为强度数据的一阶导数，红色实线为 Gaussian 拟合曲线，拟合所得的半高宽 (FWHM) 代表光斑尺寸

Fig.2 Typical X-ray focus beamsize at sample position S1: Horizontal (a) and vertical (b) beamsize focused at 30 keV using CRLs. Black solid squares denote the measured intensity data, blue solid spheres and red lines represent the corresponding first-derivative data and Gaussian fits to the derivative data, respectively. The yields FWHM represent the beamsize

表 1 HEPS 高压线站的主要光学技术参数

Table 1 Main optical technique parameters of high-pressure beamline at HEPS

	GPT	LHT	Sub-μT
Source	In-Vacuum Undulator		
Monochromator	Liquid-nitrogen-cooled Si(111) and Si(220) double crystal		
Focus elements	CRL1+CRL2a	CRL1+CRL2b	K-B
Focused beamsize at sample position $H \times V^*$	$\sim 2.8 \mu\text{m} \times 2.4 \mu\text{m}$	$\sim 3.7 \mu\text{m} \times 3.5 \mu\text{m}$	$\sim 144 \text{ nm} \times 149 \text{ nm}$
Photon flux at sample position*	$\sim 1 \times 10^{13}$ phs/s	$\sim 2 \times 10^{12}$ phs/s	$\sim 9 \times 10^{11}$ phs/s
Energy	30 keV, 40 keV, 50 keV	30 keV	30 keV

* The beam size and photon flux were measured at an X-ray energy of 30 keV and a storage-ring current of 100 mA.

实验站的整体布局如图 3 所示。实验站由三个实验平台组成，包括通用实验平台（General Purpose Table, GPT）、激光加热实验平台（Laser Heating Table, LHT）和亚微米实验平台（Sub-micrometer Table, Sub- μ T）。其中，GPT 和 LHT 分布于通用实验棚屋中，Sub- μ T 布置于亚微米聚焦专用实验棚屋中。GPT 作为微米光斑下的多功能高压 X 射线衍/散射表征平台，配置了低温、电阻加热以及动态加载等环境装置，支持利用粉末（多晶）、单晶、径向 XRD 以及 PDF 等多种实验方法，开展不同压力—温度—时间尺度下的原位结构表征研究。LHT 是针对激光加热高压 XRD 实验优化设计的平台，利用双面激光加温实现高温高压条件下物相结构演化的原位研究。Sub- μ T 主要面向需要亚微米光斑的超高压 XRD 实验，样品位置处的聚焦光斑由预成形的先进 K-B 镜实现。为满足高精度样品扫描和定位需求，该平台配备了承载能力相对较小但定位精度和分辨率更高的纳米位移台。同时，对亚微米聚焦棚屋做了专门的温度控制设计，以提高环境温度稳定性，降低热漂移对光斑和样品位置稳定性的影响。三个实验平台采用相互独立的聚焦光学方案，根据实验需求采用分时段交替运行模式。

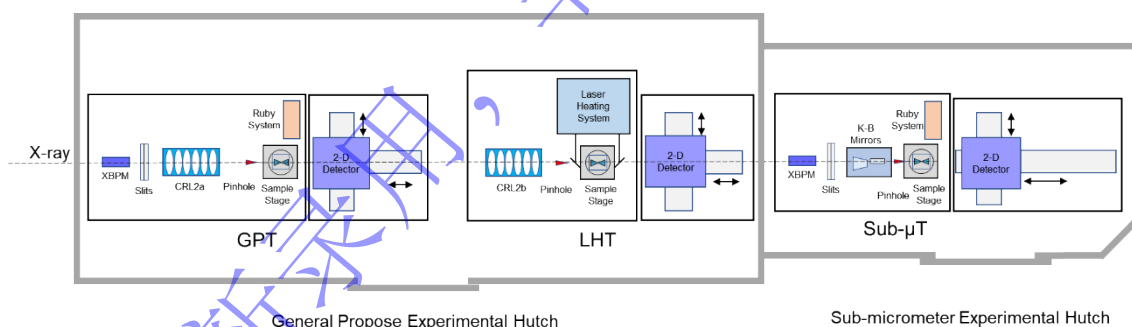


图3 实验站布局示意图

Fig. 3 Schematic layout of the experimental stations

1.2 实验站关键设备

高压 XRD 实验的测量精度与数据质量不仅取决于入射 X 射线的性能, 还受到实验设备稳定性、衍射信号探测能力及样品腔压力状态等因素的共同影响。围绕样品定位精度、衍射信号采集和压力测控三个核心环节, 本线站配置了高精度样品定位系统、高能二维面探测器以及在线压力测量与远程控制系统。这些设备共同实现样品—光束—探测器几何关系的准确建立、衍射信号的高效记录及实验压力路径的准确控制, 为不同压力、温度和时间尺度下的原位结构表征提供基础条件。

1.2.1 样品定位系统

样品定位系统为保持高压 XRD 实验几何的稳定性和数据可靠性提供基础保障，实验中要求待测样品、X 射线聚焦光斑及样品台旋转中心三者严格重合，以减小旋转采集过程中因样品偏心引起的位置误差，并保持不同旋转角度下样品—探测器距离的稳定。聚焦光斑尺寸越小，对样品台定位精度的要求越高。基于各平台实验方法和光斑尺寸的差异化需求，本线站配置了运动精度和承载能力不同的样品定位系统，均由多套高精度直线位移台和转台组合而成，以实现样品的三维精确定位与绕特定轴的稳定旋转。

GPT 与 LHT 的定位系统结构相近，均具备六维运动自由度。自上而下主要包括上层 X-Y 定位台、垂直运动台、绕 Z 轴旋转的水平转台以及具有更大台面和更高承载能力的底层 X-Y 定位台。考虑到 GPT 需要承载低温、高温和动态加载等自重较大的样品环境设备，其样品台在设计和选型上兼顾了高负载能力和机械稳定性。Sub- μ T 主要面向亚微米光斑条件下的超高压微区衍射，该平台采用微米位移台与纳米位移台相结合的复合定位方案，即下方微米精度位移台用于提供毫米量级的大行程调节能力，上方纳米精度位移台用于实现最终的高精度位置移动和扫描控制，最终保证样品台系统在较大运动范围的同时，实现纳米级定位精度要求。

为辅助样品定位，本线站各实验平台均配置了光电二极管或金刚石电离室。光电二极管可根据 X 射线穿过 DAC 样品腔及封垫后的吸收衬度确定样品位置，也可用于扫描聚焦光斑的强度分布以获得光斑尺寸。金刚石电离室集成于 X 射线挡光器中，在阻挡直通光的同时实现 X 射线强度的在线监测，且不额外占用样品台附近的有限空间。根据实验需求，可以采用一维线扫描或二维面扫描的方式对 DAC 样品腔内的样品进行精确定位。

图 4 展示了在 GPT 样品台对 DAC 样品腔内进行样品定位的结果。其中，图 4(a)为光学显微镜下 DAC 样品腔的实物照片，S1 和 S2 分别为红宝石球和合金球。图 4(b)为样品腔的二维扫描强度图像，反映了 S1 和 S2 样品对 X 射线的吸收衬度分布。图 4(c)为沿样品孔近中心高度处获得的一维线扫描曲线，表征了透射 X 射线强度随扫描位置的变化情况。可以看出，扫描获得的样品形貌与实际样品腔中样品的空间尺寸基本一致。需要指出的是，实际操作中，扫描范围与步长的选取直接影响数据采集时长，用户可综合考虑光斑尺寸、分辨率需求以及实验效率，灵活调整扫描参数。

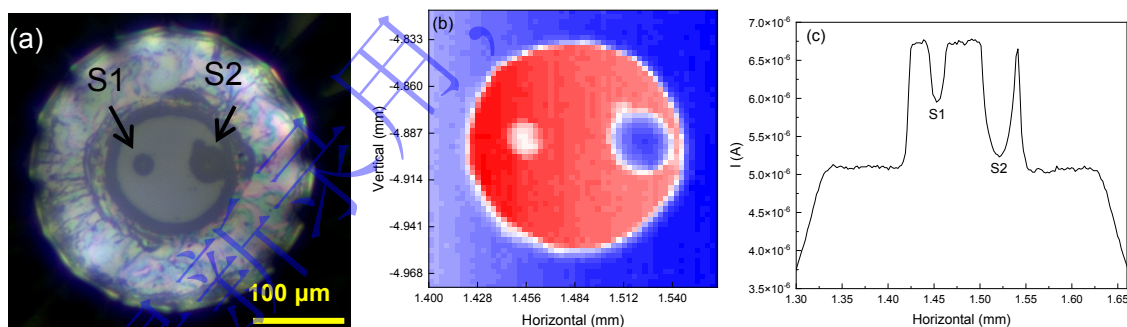


图 4 DAC 样品腔内样品定位: (a) 光学显微镜下样品照片, (b) 二维扫描吸收衬度图, (c) 沿样品腔近中心高度位置的一维扫描强度曲线

Fig.4 Sample positioning in the DAC sample chamber: (a) Optical microscope image of the sample in the DAC, (b) 2D scanning intensity map showing the absorption contrast of the samples, (c) 1D intensity profile along the approximate center height of the sample hole with peak positions corresponding to the sample locations

1.2.2 探测器

探测器是实现高压 XRD 数据高效采集与准确记录的关键，其性能直接影响了数据采集效率、信噪比、时间与空间分辨能力以及可开展的实验方法。目前本线站配置了三台面探测器，包括两台像素阵列探测器 Eiger 2 XE CdTe 16M 和 Pilatus 3X Si 2M，一台平板探测器 IRAY NDT1717HS。其中，Eiger 2 XE CdTe 16M 主要在 GPT 和 Sub- μ T 平台使用，其高帧频特点可用于动态加载条件下的时间分辨衍射实验，CdTe 传感器保证了它在 30 keV 以上能量范围具备更高的计数效率；Pilatus 3X

Si 2M 主要在 LHT 平台使用；IRAY NDT1717HS 平板探测器具有更大的探测面积和无死区特点，主要用于高压 PDF 和径向 XRD 实验。三款探测器的主要性能参数见表 2。

表 2 HEPS 高压线站探测器的主要参数

Table2 Main technique parameters of the detectors at the HEPS high-pressure beamline

Detector	Specifications	Parameters
Eiger 2 XE CdTe 16M	Sensor material	CdTe
	Pixel size (μm^2)	75×75
	Active area (mm^2)	327.8×311.2
	Image bit depth (bit)	32/16
	Maximum frame rate (Hz)	1000 (1 pixel $\times$ 1 pixel)
Pilatus 3X Si 2M	Sensor material	Si
	Pixel size (μm^2)	172×172
	Active area (mm^2)	254.8×291.5
	Image bit depth (bit)	20
	Maximum frame rate (Hz)	250 (1 pixel $\times$ 1 pixel)
IRAY NDT1717HS	Sensor material	Si
	Scintillator	CsI
	Pixel size (μm^2)	139×139
	Active area (mm^2)	427×425
	Image bit depth (bit)	16
	Maximum frame rate (Hz)	30 (1 pixel $\times$ 1 pixel)

1.2.3 在线压力测试与控制

DAC 样品腔内压力的精确标定与稳定控制是获取可靠物性演化规律的基础。目前，本线站支持衍射内标法^[34]、红宝石荧光法^[35]以及金刚石一阶拉曼峰标压法^[36]三种在线测压方法，并配备了气膜加压系统，以实现样品腔内压力的远程控制。

三种在线测压方法具有不同的使用范围和操作方式。衍射内标法压力范围适用宽，仅需通过样品台切换样品与压标的测量位置，无需反复移入光学测压系统。压标的选择需综合考虑实验压力范围、化学稳定性、衍射峰位置是否与样品峰重叠以及是否适用于高温或低温环境等因素。红宝石荧光法无需移动样品位置，通过移入测压光路系统即可监测加载过程中的压力变化。在非静水压条件下，红宝石荧光峰会发生展宽以及强度变低，尤其在高于约 35 GPa 的非静水压条件，R1 和 R2 荧光峰难以分离，影响压力标定。在低温环境下，温度越低，R1 和 R2 荧光峰相对位置差别越大^[37]，有利于压力标定。金刚石拉曼法更适用于超高压或红宝石荧光信号较弱、难以分辨的情况。由于金刚石砧面的应力分布存在空间梯度，拉曼信号的采集位置、激光聚焦区域以及峰形分析都会影响最终压力标定结果。实验过程中，用户可根据具体实验需求选择压力标定方法，对样品腔压力进行监测。GPT、LHT 和 Sub- μT 三个实验平台均配置了气膜加压系统，通过调节膜片内气体压力推动 DAC 加载机构，实现 DAC 样品腔内压力的远程、连续和精细调控。该系统可以在不移动 DAC 和不破坏样品—光束—探测器几何关系的情况下调节压力，减少因开关实验棚屋屏蔽门、手动加/卸压带来的额外中断时间，大幅提高实验效率。

结合上述关键设备，图 5 为 GPT 样品台气膜加压实验照片。沿光束传播方向自上游至下游，主要元件包括挡杂散光的屏蔽板、针孔、组装 DAC 的气膜加压系统、在线测压系统、挡光器以及探测器。通常情况下，样品到探测器的距离约 300 mm，可以满足大部分高压 XRD 实验需求。用户也可根据实际需求，调整探测器位置进行衍射数据采集。

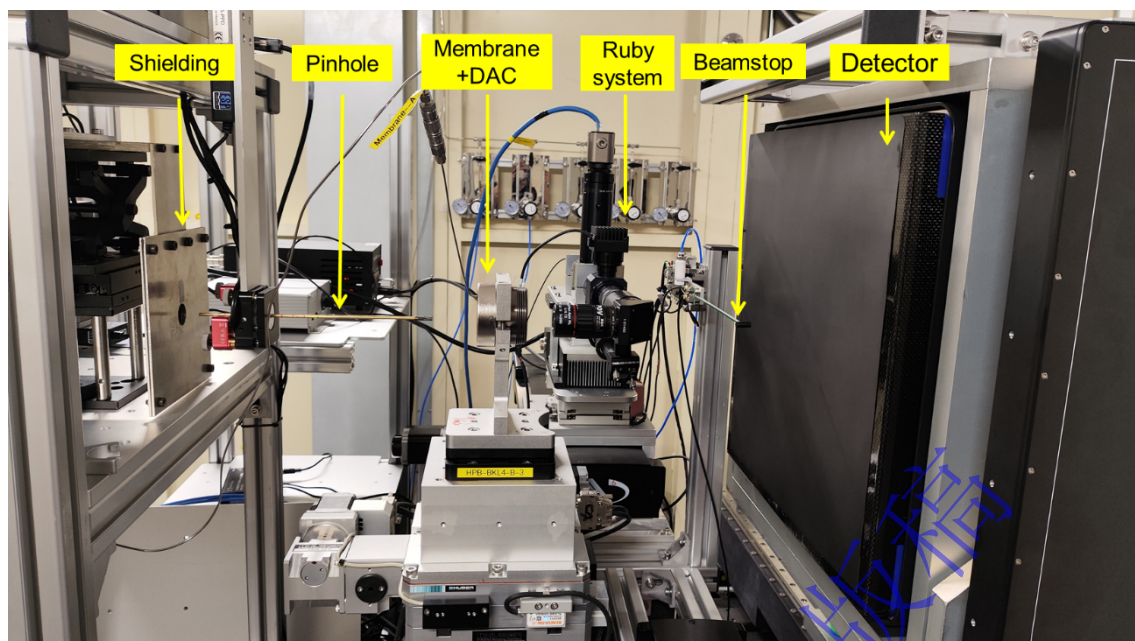


图 5 GPT 样品台气膜加压 XRD 实验照片

Fig.5 Image of membrane controlled high-pressure XRD experiment setup at GPT sample stage

2 高压线站实验方法

高压线站主要利用单色光 X 射线衍/散射技术对 DAC 中样品进行不同压力下的结构演化表征，在衍射几何上，采用角分辨透射模式，即由光束线上游聚焦的 X 射线穿透 DAC 照射到样品上时发生衍射，在下游的面探测器记录衍射信息。针对不同的实验研究需求，可以利用高压粉末（多晶）、单晶、径向 XRD 以及 PDF 等实验方法。由于不同的实验方法在样品准备、实验几何、数据采集以及分析流程等方面存在差异，下文将结合 HEPS 高压线站的实验条件分别介绍，并通过实验结果展示线站的测试与应用能力。

2.1 高压粉末衍射

粉末衍射是高压研究中最常用的实验方法，广泛用于样品的压致结构相变、状态方程以及熔化曲线等研究中。在微米聚焦光斑下的高压实验中，由于 X 射线照射区域较小，往往导致参与衍射的样品晶粒数量较少，难以满足粉末衍射所需的统计均匀性，无法在面探测器上形成连续光滑的衍射环。为了提高数据质量，用户可从样品准备、压砧选型及数据采集方式三个方面加以优化。首先，样品研磨越细，单位照射体积内的晶粒数越多，有助于改善统计均匀性。其次，可选用 Bohler 型压砧，其较大的接收角度配合大面积二维探测器，能够在单次曝光中收集更多的衍射数据。此外，高精密旋转台允许样品在采集衍射信号绕轴旋转，使更多取向的晶粒满足布拉格条件，从而进一步改善衍射环的统计均匀性。目前，本线站的三个实验平台均可结合远程控制气膜加压系统，开展高压粉末衍射实验。Yue 等人利用高压线站 GPT 实验平台对 PbSnSe_2 的高压结构演化进行了原位表征^[38]，结果图 6 所示。图 6(a)展示了不同压力下获得的 XRD 图谱。结果表明，当压力升至 22.5 GPa 时，在衍射角约 9° 处出现新的衍射峰，且随着压力增大，该新峰的强度逐渐增加。为进一步确认加压过程中的结构变化，分别对 1.6、27.3 和 49.3 GPa 下获得的衍射图谱进行了 Le Bail 精修，结果如图 6(b)–(d)所示。精修结果表明， PbSnSe_2 在实验压力范围内发生了从正交到立方相的结构转变。该结果为厘清 PbSnSe_2 高压下金属化、超导电性与晶体结构之间的关联提供了重要实验依据。

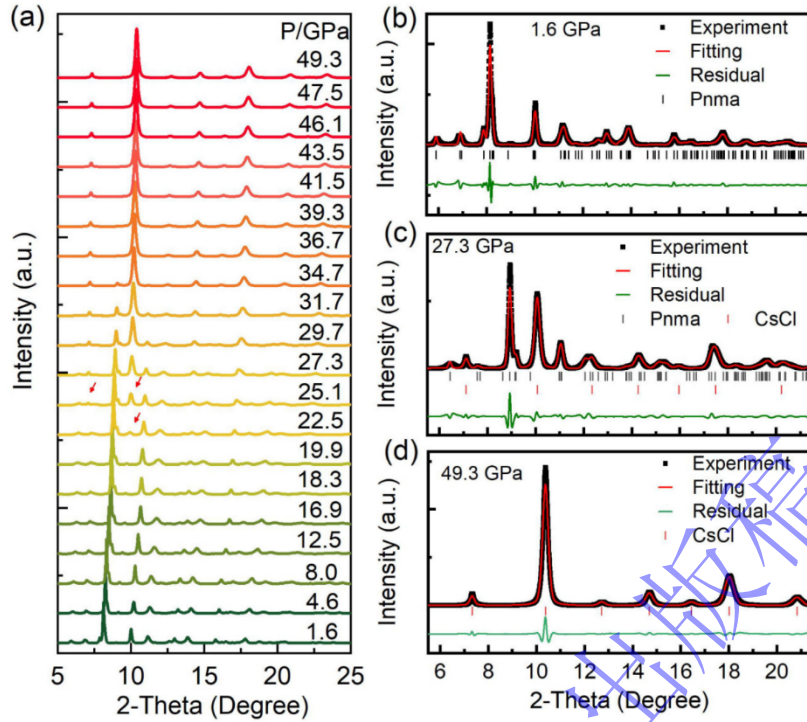


图 6 高压下 PbSnSe₂ 的同步辐射 XRD 实验结果^[38]: (a) 在 ID31 线站采集的不同压力下的 XRD 图谱, (b) 1.6 GPa、(c) 27.3 GPa 和 (d) 49.3 GPa 时 XRD 图谱的 Le Bail 精修结果

Fig.6 Synchrotron XRD measurement of PbSnSe₂ under high pressure^[38]: (a) The x-ray diffraction patterns at various pressures collected at ID31 beamline, representative patterns of Le Bail refinement at (b) 1.6 GPa, (c) 27.3 GPa, and (d) 49.3 GPa

2.2 高压单晶衍射

高压单晶 XRD 是精确解析材料晶体结构的重要实验方法。与粉末 XRD 相比,单晶衍射强度分布在离散的倒易点阵位置,通常具有更高的信噪比,并可显著减少不同晶面衍射峰之间的重叠。通过测量单晶样品在三维倒易空间中的衍射斑点位置及其积分强度,可获得晶胞参数、空间群、原子坐标和占位等结构信息,从而更加灵敏地识别在压力作用下发生的晶胞畸变、对称性变化和原子结构演化。目前,本线站已依托 GPT 平台建立了较为完整的高压单晶 XRD 数据采集与处理流程。实验采用 Eiger 2 XE CdTe 16M 二维面探测器记录衍射图像。在正式采集用户样品数据之前,首先对衍射系统进行几何标定。利用 CeO₂ 标准粉末对样品-探测器距离、光束中心、探测器倾斜角及面内旋转角等参数进行初步标定;在此基础上,采用晶体结构已知的斜方顽火辉石单晶进一步建立并优化 CrysAlisPro^[39] 中的仪器几何模型。所用斜方顽火辉石的化学组成为 (Mg_{1.93}Fe_{0.06})(Si_{1.93}Al_{0.06})O₆, 空间群为 *Pbca* (No. 61), 晶胞参数为 $a=18.2391(3)$ Å、 $b=8.8117(2)$ Å 和 $c=5.18320(10)$ Å。正式采集样品时,首先利用高精度样品台将装载单晶样品的 DAC 调整至 X 射线焦点,并使样品位置与测角仪旋转中心准确重合;随后,在 DAC 开口角允许的范围内,驱动 DAC 绕垂直轴旋转,连续采集不同取向下的单晶衍射数据。在数据格式转换方面,基于 ewoksscxd 软件包^[40],已实现 Eiger 探测器原始 HDF5 数据向 Esperanto 格式的自动转换,使采集的数据能够直接衔接 CrysAlisPro 的斑点索引、强度积分和结构解析流程。图 7 为利用 CrysAlisPro 对高压线站 GPT 实验平台采集的斜方顽火辉石单晶衍射数据进行重构后获得的倒易点阵平面。清晰且规则排列的衍射点表明,所采集数据具有良好的几何一致性和可索引性,验证了本线站从探测器几何标定、数据格式转换和衍射斑点索引到晶体结构解析的完整单晶数据处理流程。

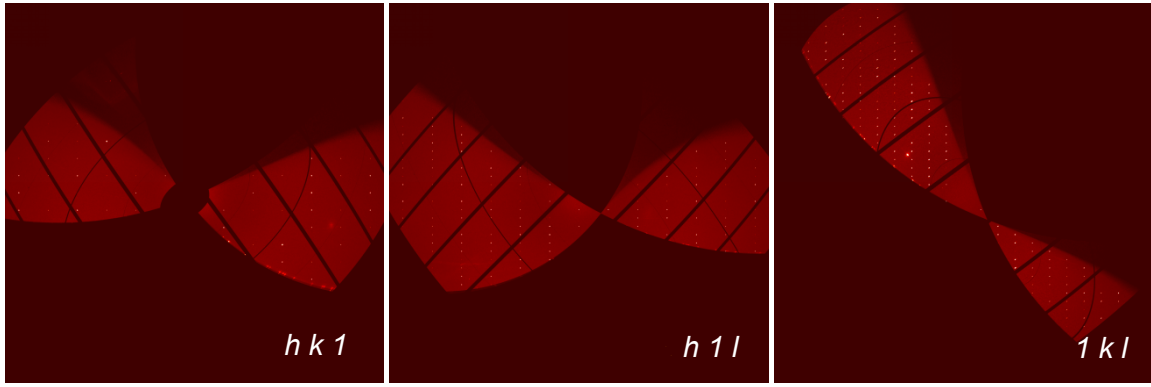


图 7 利用 CrysAlisPro 重构的斜方顽火辉石单晶倒易点阵平面

Fig.7 Reconstructed reciprocal-lattice planes of the ortho-enstatite single crystal generated using CrysAlisPro

2.3 高压径向衍射

径向 XRD 是表征 DAC 样品在非静水压条件下晶格应变、差应力和织构演化的重要实验方法。与入射 X 射线近似平行于 DAC 加载轴的轴向衍射不同，径向衍射采用入射光束垂直于 DAC 加载轴的实验几何，使 X 射线从样品腔的径向方向穿过样品，并由透射方向的二维探测器记录衍射信号。在非静水压条件下，DAC 样品内部的轴向应力与径向应力存在差异，使不同空间取向的晶面产生不同程度的晶格应变。晶面间距随衍射矢量与加载轴夹角的变化而改变，在二维衍射图像中表现为衍射峰位置随方位角发生变化。随着压力的改变，衍射强度可能沿方位角方向的非均匀分布，在排除晶粒统计、吸收和实验几何等因素影响后，该变化可用于表征压力作用下的晶粒取向。目前，径向 XRD 在研究高压下的材料强度、变形机制、应变各向异性以及织构演化等方面具有广泛应用，详细的理论和应用实例可参考 Singh 等人^[41]的工作。

为支持径向 XRD 实验，本线站除配置远程气膜加压系统、实现 DAC 压力的原位调控外，还配备了无拼缝平板探测器，可避免探测器模块间隙造成的衍射信息缺失，获得方位角方向连续的二维衍射环。图 8(a)为在高压线站 GPT 平台开展径向 XRD 实验照片。实验采用具有较大侧向开口的 DAC，以提高有效衍射角及方位角覆盖范围。图 8(b)为 FeNi 基合金在 38 GPa 条件下获得的径向 XRD 二维衍射环沿方位角展开图。可以看出，不同晶面的衍射峰在方位角方向上表现出不同程度的峰位变化和强度差异。其中，峰位变化主要反映不同取向晶面的晶格应变响应，强度差异则与晶粒取向及织构特征有关。结合高压晶格应变理论对峰位变化进行拟合，并分析衍射强度的方位角分布，可进一步获得不同晶面的应变响应、差应力及择优取向信息。

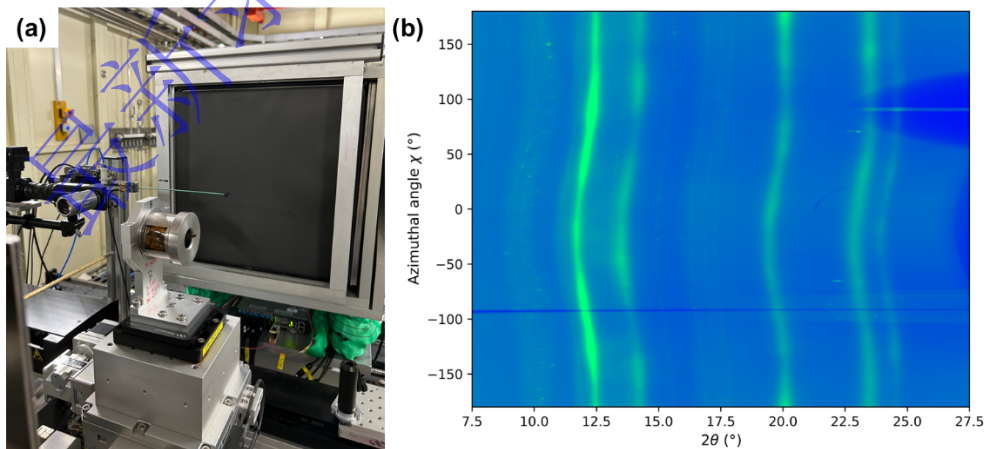


图 8 径向高压 XRD 实验测试: (a) 径向高压实验照片, (b) FeNi 基合金在 38 GPa 下径向 XRD 二维衍射环沿方位角展开图 (未发表数据)

Fig.8 Radial high pressure XRD measurement: (a) Image of the radial high-pressure experimental setup, (b) Azimuthal unwrapping of the two-dimensional radial XRD rings collected from the FeNi alloy at 38 GPa (Unpublished data)

2.4 高压对分布函数

基于全散射技术的 PDF 方法是综合利用 X 射线全散射数据中的布拉格散射和漫散射信息，通过傅里叶变换获得实空间原子对距离分布，进而用于晶体和非晶体的局域结构表征研究^[42]。在高压 DAC 环境下获取高质量的 PDF 数据，需要对样品制备、实验几何、数据采集和背景校正进行系统优化^[43]。实验数据应覆盖尽可能宽的散射矢量 $Q(Q=4\pi\sin\theta/\lambda)$ 范围，并保证高 Q 区间的信噪比，以提高实空间分辨率并减小傅里叶变换的截断效应。同时，需要获得连续且统计均匀的衍射环，并采集来自金刚石压砧、垫片、传压介质和空气路径等背景信号，以便进行准确扣除。受 DAC 结构和实验几何限制，非弹性散射与多重散射的贡献通常难以独立测量和完全分离，数据处理中仍需结合模型或经验方法进行校正，可采用 Billinge 等人发展的快速 PDF 算法及相应的软件 PDFGetX3^[44]，对背景扣除后的全散射数据进行了校正和归一化处理，获得结构因子 $S(Q)$ 和约化原子对分布函数 $G(r)$ ，从而进行局域结构分析。

本站开展高压 PDF 实验时主要采用能量约为 50 keV 的高能单色 X 射线。较短的 X 射线波长和大面积二维探测器，能够扩大实验覆盖的 Q 值范围。高能 X 射线对金刚石压砧、封垫及传压介质具有更强的穿透能力，可以降低样品环境吸收对散射信号的影响。图 9 展示了 CuZr 基非晶合金在常压和高压条件下获得的 PDF 测试结果。图 9(a)和图 9(b)分别为常压条件下获得的结构函数 $S(Q)$ 和约化原子对分布函数 $G(r)$ 。可以看出，常压数据曲线光滑，整体质量较好。 $S(Q)$ 中结构振荡清晰，高 Q 区域噪声较低，对应的 $G(r)$ 峰形较为稳定，能够较好地反映 CuZr 基非晶合金的局域原子排列特征。图 9(c)和图 9(d)分别为 DAC 高压环境下获得的 $S(Q)$ 和 $G(r)$ 数据。与常压结果相比，高压条件下 $S(Q)$ 在高 Q 区域出现了较明显的噪声和非物理振荡，并进一步影响傅里叶变换后的实空间结果，使 $G(r)$ 中出现了基线波动和峰形畸变，从而降低了局域结构解析的可靠性。高压线站已具备开展 DAC 高压 PDF 实验的基本条件，但受 DAC 样品环境背景信号强和高角度散射信号弱等因素影响，仍需进一步优化，提高高压 PDF 数据质量。

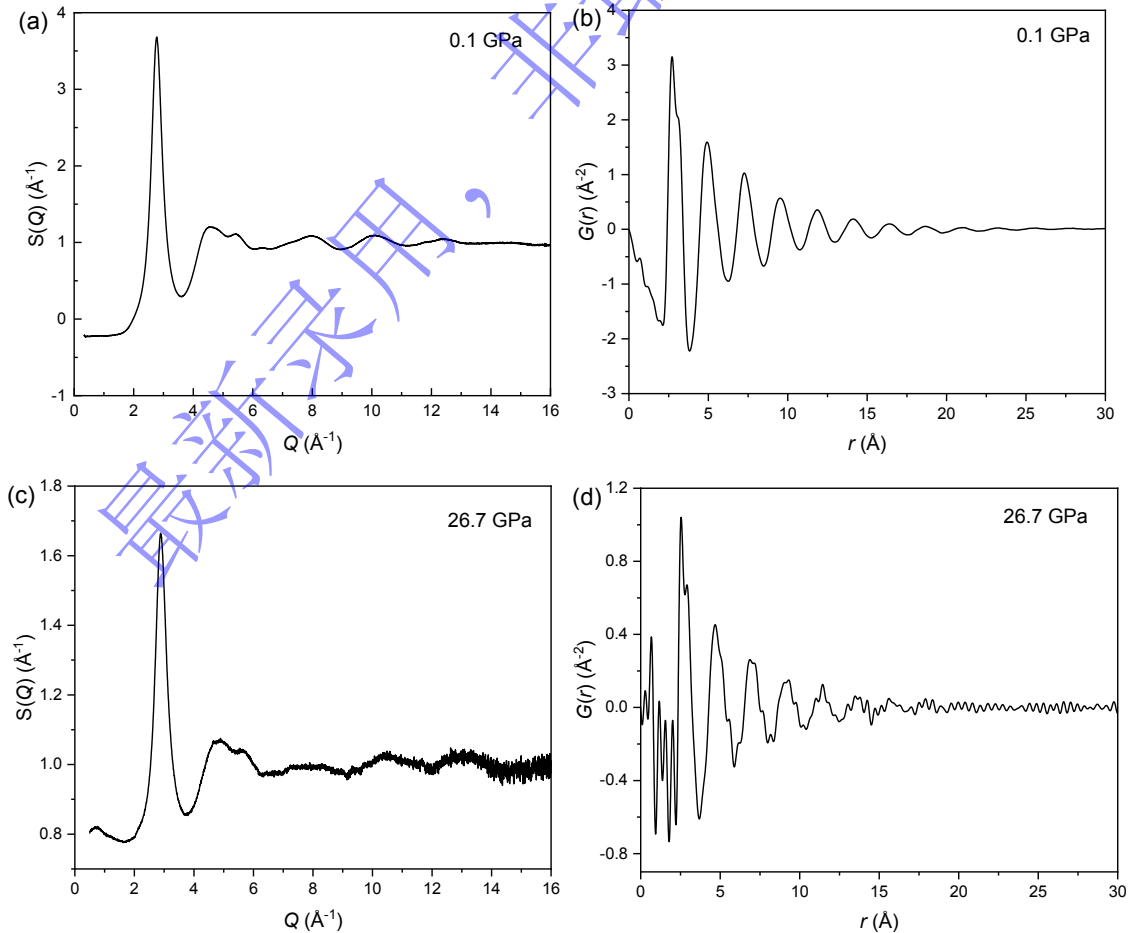


图 9 CuZr 基非晶合金在常压和高压条件下的 PDF 测试结果: (a) 常压条件下获得的结构函数 $S(Q)$, (b) 由常压 $S(Q)$ 傅里叶变换得到的约化原子对分布函数 $G(r)$, (c) DAC 高压环境下获得的 $S(Q)$, (d) 对应的高压 $G(r)$ (未发表数据)

Fig.9 PDF results of the CuZr-based metallic glass under ambient and high-pressure conditions: (a) Structure function $S(Q)$ collected under ambient conditions, (b) the corresponding reduced pair distribution function $G(r)$ obtained by Fourier transformation of the ambient-pressure $S(Q)$, (c) $S(Q)$ collected under high-pressure conditions in a DAC, (d) the corresponding high-pressure $G(r)$ (Unpublished data)

3 高压线站样品环境

高压条件下, 物质的结构演化对温度、时间及加载路径高度敏感。深入研究物质的热力学稳定性、相变路径及动力学演化机制, 需要利用能够实现复杂条件协同调控的样品环境装置。本线站围绕 DAC 实验技术, 配置了低温、电阻加热、激光加热和动态加载四类样品环境装置, 覆盖了从低温到高温、从静态压缩到快速加载的多种实验条件, 可满足不同样品体系和研究目标对原位结构表征的需求。此外, 线站还配套建设了专用辅助实验室, 为用户在实验期间开展 DAC 垫片制备、激光打孔、气体加载和样品装填等临时准备工作提供基本保障。

3.1 低温高压环境装置

低温高压装置通过在 DAC 加载状态下建立稳定、可控的低温环境, 实现压力与温度的耦合调节。结合粉末(多晶)、单晶 XRD 以及 PDF 等实验方法, 可研究压力诱导下的材料结构相变、金属-绝缘体转变、超导材料结构演化及强关联电子体系的晶格响应等前沿物理问题, 为揭示低温高压条件下物质结构与性能之间的关联提供实验依据。

本线站提供的低温高压装置采用紧凑型无液氦闭循环制冷设计, 既可减少液氦消耗和运行成本, 又有利于与线站实验几何相匹配。该装置最低温度可达 4 K 以下, 能够与常规物性测试平台获得的电输运、磁性或热学测量结果进行关联分析。低温恒温器的出射窗口张角约为 60° , 可满足透射几何下的二维 XRD 数据采集要求。恒温器主要适用于直径小于 48 mm、高度约 37 mm 的常规对称型 DAC。实验过程中, DAC 固定在低温恒温器冷指上, 以保证良好的热传导; 硅二极管低温温度计安装于 DAC 套筒侧面的锥孔内并靠近样品腔区域, 结合温控仪监测和控制 DAC 温度。恒温器内部采用双气膜结构, 分别用于 DAC 的加压与卸压控制, 以提高低温高压实验过程中温度和压力的协同调节能力。

图 10 为 GPT 样品台上进行低温高压 XRD 实验测试结果。图 10(a)为采用透射模式开展低温高压 XRD 实验的照片。利用该装置在 24 K 温度下对 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_{7+\delta}$ 超导样品进行了原位同步辐射 XRD 测试, 结果如图 10(b)所示。整个加压过程中, 衍射峰保持清晰, 未观察到峰分裂、合并或新衍射峰出现, 且均可由 $14/\text{nm}$ 空间群指标化, 表明了四方相在实验压力范围内保持良好的结构稳定性。该结果为理解 Ruddlesden-Popper 镍酸盐的超导机制提供了新的视角, 并强调了压力诱导电子重构在超导发生中的关键作用, 而非仅局限于结构层面的考量^[45]。

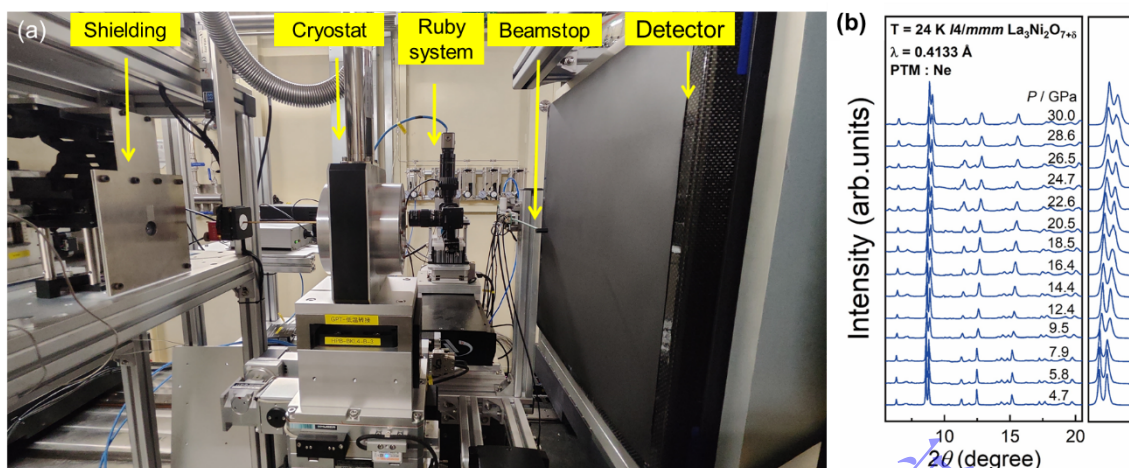


图 10 GPT 低温高压 XRD 测试: (a) 低温高压测试实验照片, (b) 24 K 温度下对 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_{7+\delta}$ 超导样品不同压力下的 XRD 图谱^[45]

Fig.10 Low-temperature high-pressure XRD measurement: (a) Image of the low-temperature high-pressure experimental setup on the GPT, (b) XRD patterns of $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_{7+\delta}$ collected during compression at 24 K^[45]

3.2 电阻加热高压装置

电阻加热是 DAC 高温高压实验中获得高温的常用途径之一, 其原理是将加热元件置于 DAC 外部或压砧附近, 通过热传导和热辐射方式对样品进行间接加热。常用的电阻加热方式包括 DAC 整体加热^[46]、微型电阻丝^[47]、电阻炉^[6]、石墨电极加热^[48]或微型加热环^[8], 可根据目标温度与样品腔空间灵活选用。

本线站配备的电阻加热高压装置采用石墨电极加热方式, 设计过程中综合考虑了加热温度范围、DAC 安全性、压力远程控制、实验几何兼容性、样品位置稳定性以及线站运行安全等因素。温度控制通过调节加热电源的电流和电压参数实现, 加热源可根据实验需求选择石墨片、Pt 丝、W 丝或 NiCr 合金电阻丝等材料, 通过热传导和热辐射将热量传递至样品区域。为降低高温条件下金刚石压砧的氧化和石墨化风险, DAC 置于由机械泵抽至低真空状态的密封腔体内。压力控制方面, 装置采用双气膜结构, 并利用压力控制器实现 DAC 样品腔的加压与卸压调节。此外, 该装置配有循环冷却水系统, 对 DAC 支架和相关支撑结构进行冷却, 以降低加热过程中 DAC 主体的温度升高, 减小热膨胀对压力稳定性和样品位置稳定性的影响。

图 11 展示了电阻加热高压装置的离线测试情况。其中, 图 11(a)为加热装置离线测试时的照片, 实验通过调节加热电源的输出电流和电压控制加热功率及温度。由于加热元件的材料和电阻特性不同, 其可达到的温度范围也存在差异。图 11(b)给出了采用 W 丝和 NiCr 丝作为加热元件时温度随时间的变化曲线, 曲线中的拐点对应人工调节电流和电压的时刻。测试过程中最高温度可达 1300 K, 初步验证了该装置开展高温高压同步辐射 XRD 实验的加热能力。后续仍需开展带光测试与系统优化, 进一步评估其样品位置漂移以及高温样品环境对衍射数据质量的影响。

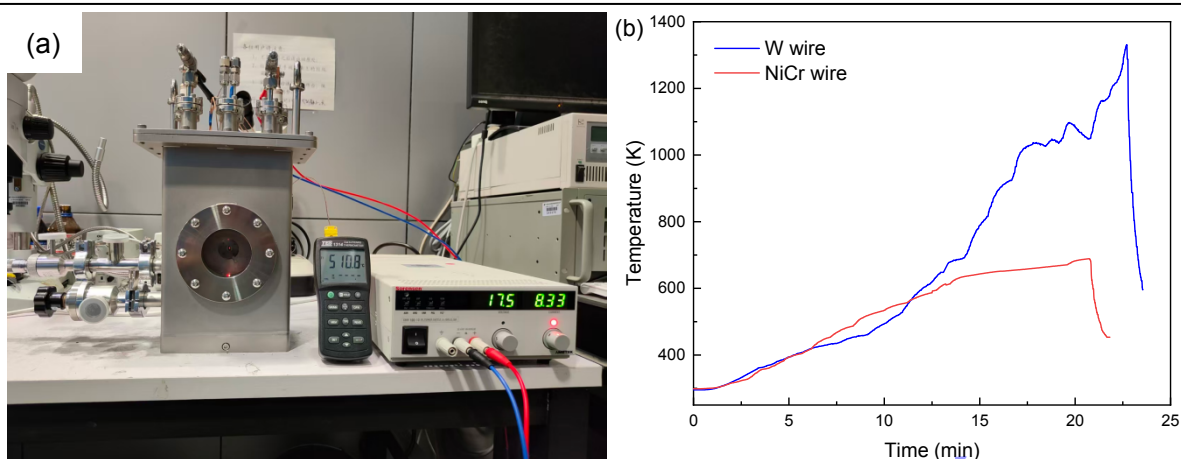


图 11 电阻加热高压装置离线温度测试: (a) 加热装置实际测试照片, (b) 利用不同电阻丝所测得温度

Fig.11 Temperature measurement of the resistive heating high-pressure device: (a) Image of the resistive-heating high-pressure device, (b) Offline temperature testing with various resistive heating wires

3.3 激光加热系统

激光加热是同步辐射高压线站实现极端高压高温原位结构表征的重要实验技术^[49]。该方法通过将高功率激光聚焦至 DAC 样品腔内的微米尺度样品区域,使样品吸收激光能量后快速升温,从而在静态高压条件下获得数千开尔文的高温环境,可用于研究高温高压下的结构相变、熔化行为及物质热力学性质。

本线站激光加热高压 XRD 实验在专用 LHT 平台上开展。激光加热系统采用双面加热设计,最高加热温度可超过 4000 K。目前系统主要使用连续激光加热模式,并在开发脉冲加热实验方式。激光加热光斑尺寸可在约 10~200 μm 范围内调节,以适应不同样品尺寸、压力条件和实验目标的需求。为降低其他设备振动、热漂移和机械扰动对激光光路稳定性的影响,系统光路整体搭建在厚光学面包板上,并与 LHT 平台的大理石基座固定连接。实验中 DAC 固定于水冷铜质支架上,通过循环水冷减少热量向 DAC 主体及周围机械结构传递,从而减小热漂移并提高装置运行稳定性。图 12 展示了 LHT 平台双面激光加热系统的在线测试结果。其中,图 12(a)为 LHT 双面激光加热实物图,图 12(b)为水冷铜质 DAC 支架,图 12(c)为利用 LHT 对 CaFe_2O_4 型矿物相在高温高压条件下采集的 XRD 数据,其结果可为约束该矿物的热力学状态方程提供高压实验依据,在地球物理学研究中具有重要参考价值。

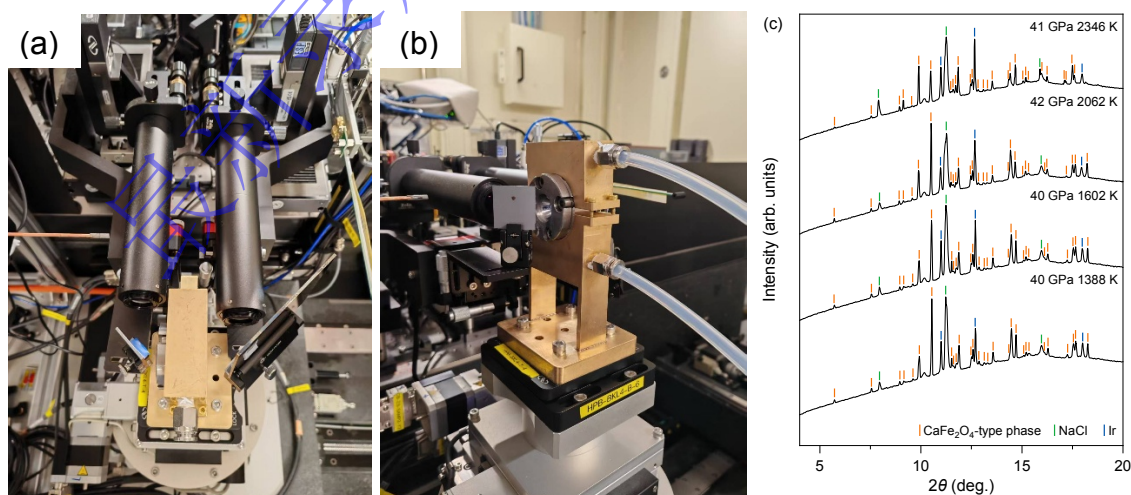


图 12 激光加热高压 XRD 测试: (a) LHT 双面激光加热照片, (b) 水冷铜质 DAC 支架, (c) CaFe_2O_4 型相高温高压下的 X 射线衍射谱。竖直刻线表示不同温度压力条件下不同相的衍射峰。橙色: CaFe_2O_4 型相; 绿色: B2 型 NaCl; 蓝色: 铱 (未发表数据)

Fig.12 Laser heating high pressure XRD measurement: (a) Image of double-sided laser heating at the LHT, (b) the water-cooled copper DAC holder, (c) X-ray diffraction patterns of the CaFe_2O_4 -type phase under high-pressure and high-temperature conditions. The vertical tick marks indicate the diffraction peaks of different phases under various pressure-temperature conditions. Orange: CaFe_2O_4 -type phase; green: B2-type NaCl; blue: iridium (Unpublished data)

3.4 动态加载衍射

为揭示材料在非平衡压缩过程中的相变动力学、亚稳态结构形成以及微结构演化行为，需要研究加载速率对高压相变路径和结构稳定性的影响。在静态 DAC 基础上发展起来的快速加载金刚石对顶砧装置（dynamic Diamond Anvil Cell, dDAC），通过调控施加在压电陶瓷驱动器上的电压变化速率、驱动幅值和输出波形，可实现对样品加载或卸载速率的精确控制，从而开展不同时间尺度下的动态压缩实验^[12-14]。依托 ID31 线站的高光子通量与探测器的高帧频优势，dDAC 可在快速加载过程中同步采集 X 射线衍射信号，实现对结构演化过程的时间分辨表征。

本线站配备了单压电陶瓷驱动和三压电陶瓷驱动两类 dDAC 装置。单压电陶瓷驱动装置结构相对简单、操作方便，适合常规动态加载实验，但其驱动力相对有限。相比之下，ID31 线站研制的三压电陶瓷驱动装置具有更大的驱动力^[15]，利用红宝石荧光谱法测得的最快加压速率可达 240 TPa/s，能够满足更高加载速率条件下的动态压缩实验需求。在衍射探测方面，线站配备的 Eiger2 XE CdTe 16M 探测器最高帧频可达 1000 Hz，可满足典型快速加载实验对毫秒量级时间分辨 XRD 数据的采集需求。结合线站的高光子通量，可在较短曝光时间内获得具有足够强度和信噪比的衍射信号，从而连续记录快速加载过程中样品结构随时间的变化。图 13 展示了在约 2.1×10^4 GPa/s 的加载速率下，沿轴向和径向两种衍射几何开展的 PbS 动态压缩实验。初始状态下，PbS 为 B1 相（空间群 $Fm-3m$ ）。当压力快速升至约 3 GPa 以上时，样品发生结构相变，部分新衍射信号由原始 B1 相衍射峰分裂而来，表明初始 B1 相与中间相之间存在明确的晶体学继承关系，支持快速加载条件下以协同原子位移为特征的位移型转变机制。轴向与径向衍射图谱中部分衍射峰相对强度的差异，可能与两种几何所对应的散射矢量方向不同，以及快速加载过程中应力分布、择优取向和相变诱导织构等因素有关，但两组实验均观察到一致的结构演化序列。结合静态加载结果可知，压缩速率能够显著改变 PbS 的相变路径及其主导中间相：低压缩速率下，PbS 通过热力学驱动的形核-生长机制发生 B1 相到中间相 1 的转变；高压压缩速率下，有限的转变时间使体系优先选择动力学上更有利的相变路径，通过位移型机制转变为中间相 2。

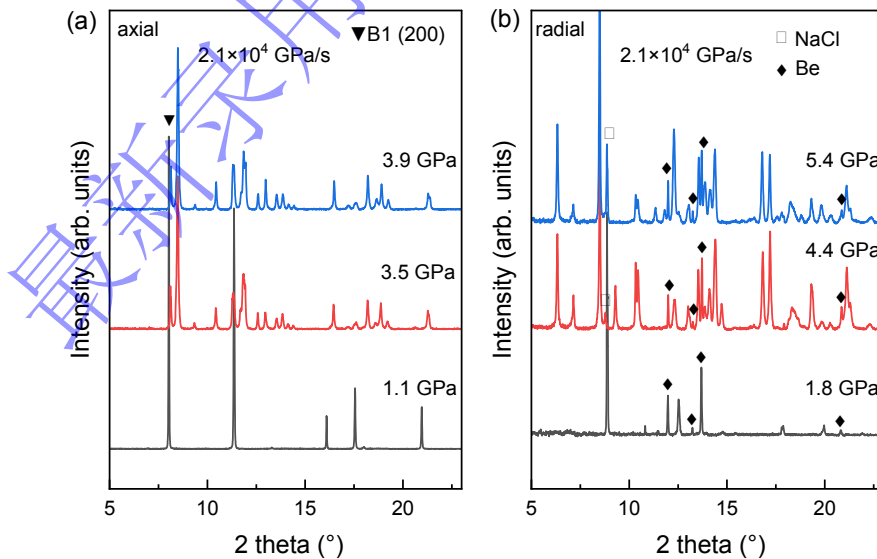


图 13 PbS 在快速加载实验中采用不同衍射几何模式获得的 XRD 结果：(a) 轴向模式，(b) 径向模式（未发表数据）

Fig.13 XRD results of PbS obtained during rapid loading experiments using different diffraction geometries: (a) axial geometry, (b) radial geometry (Unpublished data)

3.5 用户辅助实验室

高压线站配有专用的辅助实验室，目前已形成了涵盖垫片加工、气体加载、样品装填、组件清洗及干燥保存等环节的 DAC 实验准备条件。实验室内配置了多台体视显微镜、激光打孔设备、高压充气系统、集成体视显微镜的手套箱、压片机、超声清洗机以及干燥柜等，用户可根据实验需求提前预约，部分设备经过培训后可使用。其中，激光打孔设备用于 DAC 样品腔的精密加工，适用于不锈钢、铌和钨等金属垫片，可加工厚度低于 100 μm 的垫片，最小孔径约为 30 μm 。高压充气系统用于向样品腔内装填气体传压介质，目前支持 He、Ne 和 Ar 惰性气体的填充，工作压力可达 200 MPa。用户辅助实验室通过设备预约、操作培训和规范化管理，用户可在线站实验前及束流实验期间及时完成样品准备与调整，减少因装样问题造成的实验机时中断损失，从而提高 DAC 实验准备效率及同步辐射高压实验的成功率。

4 展 望

为了更全面地评估本线站在国际同类设施中的定位与竞争力，本文对比了国际上储存环能量不低于 6 GeV 的高能光源的典型高压线站的性能参数，包括 APS-U 的 16IDB 线站，ESRF-EBS 的 ID27 线站、PETRA III 的 P02.2 线站、日本 SPring-8 的 BL10XU 线站以及本线站。表 3 中汇总了各线站的工作能量范围，典型聚焦光斑尺寸、样品处光子通量、样品环境配置以及所支持的实验方法。从光束线性能和样品环境配置上看，本线站各项性能指标已与国际代表性高压线站基本相当。从实验方法来看，XRD 和 PDF 是上述高压线站普遍支持的核心技术，反映出物相鉴定、晶体结构解析、状态方程测量和局域结构研究仍是高压同步辐射实验的主要方向。在此基础上，不同线站结合自身光学条件和科学目标发展了具有特色的拓展方法：如 16IDB 支持 X 射线成像^[50]，ID27 发展了 X 射线发射谱和相干 X 射线衍射成像^[51]，P02.2 线站可以同时进行衍射与成像测试^[52]，BL10XU 可开展 ^{57}Fe 穆斯堡尔谱实验^[24]。综合比较表明，本线站在高能 X 射线覆盖、亚微米聚焦以及复杂样品环境集成等方面已经具备较强的综合能力，但在轻元素信噪比和高压 X 射线相衬成像及相干衍射成像等新方法的方面仍有提升和发展的空间。

例如，针对轻元素高压衍射信噪比不足的问题，本线站已设计加工了索拉狭缝。该准直光学元件可安装于样品与探测器之间，限制探测器接收散射光的角度范围，有效收集来自 DAC 样品腔中心区域的衍射信号，同时削弱来自金刚石压砧、金属垫片、传压介质及其他非目标区域的散射贡献，类似设备已在轻元素的高压研究中获得使用^[53-55]。目前该设备尚待在线调试与性能验证，完成后将提供给用户使用。

线站也计划建立相衬成像和布拉格相干 X 射线衍射成像 (Bragg coherent X-ray diffraction imaging, BCDI) 等实验方法。高压相衬成像将利用第四代同步辐射光源的高相干优势，通过探测样品引起的 X 射线相位变化（而非吸收差异）产生边缘增强衬度，进而获得高压条件下弱吸收样品内部相界及密度不均匀区域的高分辨图像。该技术无需复杂光学元件，可在 DAC 内原位实时观测高压下材料的固-固相变、熔化和结晶过程，尤其适用于轻元素及不透明金属样品^[52]。BCDI 则是一种基于相干 X 射线散射与相位恢复算法的无透镜三维成像技术，通过采集单颗晶体某一 Bragg 衍射峰周围的三维相干衍射强度分布，并借助迭代相位恢复算法重构实空间复电子密度分布，可在几十纳米甚至更高空间分辨率下获取晶体的三维形貌，并解析其内部应变场与缺陷分布。目前该方法结合 DAC 技术已在国际上其他光源获得应用^[51, 56, 57]。

表 3 国内外高能同步辐射装置专用高压线站的主要性能参数

Table 3 Key performance parameters of representative high-pressure beamlines at high-energy synchrotron radiation facilities worldwide

Beamline	Specifications	Sample environment	Methods
ID31 HEPS ^[33]	Energy range: 20~75 keV		
	Beamsize (FWHM, H×V):	Double-sided laser heating > 4000 K	
	2.8 μm × 2.4 μm @30 keV (CRL)	Resistive heating > 1300 K	XRD
	144 nm × 149 nm @30 keV (K-B)	Cryostat < 4 K	PDF
	Photon flux at sample position:	dDAC > 240 TPa/s	
	1 × 10 ¹³ phs/s @ 30 keV (CRL)		
	9 × 10 ¹¹ phs/s @ 30 keV (K-B)		
16IDB APS-U ^[19]	Energy range: 18~50 keV		
	Beamsize (FWHM, H×V):	Double-sided laser heating > 6000 K	XRD
	5 μm × 2 μm @30 keV (K-B)	Resistive heating > 1300 K	PDF
	2 μm × 1 μm @30 keV (K-B)	Cryostat < 4 K	XRI
	0.5 μm × 0.5 μm @30 keV (K-B)	dDAC > 34 TPa/s	
	Photon flux at sample position:		
	8.3 × 10 ¹¹ phs/s @30.491 keV (K-B)		
	1.4 × 10 ¹² phs/s @29.2 keV (K-B)		
ID27 ESRF-EBS ^[21]	Energy range: 15~60 keV		
	Beamsize (FWHM, H×V):	Double-sided laser heating > 5000 K	XRD
	0.22 μm × 0.28 μm @15 keV (K-B)	Resistive heating > 1000 K	PDF
	0.47 μm × 0.34 μm @33 keV (K-B)	Cryostat < 5 K	XES
	1.2 μm × 1.2 μm @33 keV (K-B)	P-E cell	CXDI
	Photon flux at sample position:		
	7 × 10 ¹² phs/s @15 keV (K-B)		
	1 × 10 ¹³ phs/s @33 keV (K-B)		
	2.2×10 ¹² phs/s @15 keV (K-B)		
BL10XU SPring-8 ^[24, 58]	Energy range: 6~62 keV		XRD
	Beamsize (FWHM, H×V):	Double-sided laser heating > 6000 K	PDF
	3 μm × 2 μm @30 keV (CRL)	Resistive heating > 1300 K	⁵⁷ Fe-
	12.5 μm × 11 μm @62 keV (CRL)	Cryostat < 7 K	Mössbauer
	Photon flux at sample position:		spectrometer
	1 × 10 ¹⁰ phs/s @30 keV (CRL)		
	3 × 10 ¹⁰ phs/s @62 keV (CRL)		
P02.2 PETRA III ^[23, 59, 60]	Energy range: 25.6、42.9 和 60 keV		
	Beamsize (FWHM, H×V):	Double-sided laser heating > 5000 K	XRD
	2 μm × 2 μm (K-B)	Resistive heating > 1800 K	PDF
	3 μm × 1.2 μm (CRL)	Cryostat < 4 K	XRI
	0.8 μm × 0.8 μm (CRL)	dDAC > 160 TPa/s	
	Photon flux at sample position:		
	1×10 ¹² phs/s @25.6 keV (K-B)		

XRI: X-Ray Imaging; XES: X-ray Emission Spectroscopy; CXDI: Coherent X-ray Diffraction Imaging

5 结 论

HEPS 高压线站充分利用第四代高能同步辐射光源的高能量、低发射度和高亮度特点, 结合不同的聚焦元件, 能够在不同实验样品点提供从微米到亚微米尺度的高亮度聚焦光斑, 为金刚石对顶砧压机中微小样品体积的原位衍/散射和成像实验提供关键光束条件。在实验站布局方面, 本线站根据不同高压实验需求所建设的通用实验平台、激光加热平台和亚微米实验平台, 已具备较为完整的高压实验能力。围绕多场耦合高压实验, 高压线站已建立低温、高温、激光加热和动态加载等样品环境。总体来看, 高压线站已逐步形成覆盖不同压力、温度、时间尺度和空间尺度的综合能力, 可以为用户提供从样品准备、装样、压力控制、温度调控、在线测压到同步辐射数据采集与分析的一体化实验条件。随着光学调试、样品环境集成、探测器应用、自动化控制和数据处理流程的进一步完善, 本线站有望在常规高压结构表征基础上, 进一步建立高压成像等多模态原位表征方法, 促进多学科领域开展极端条件物质结构与动力学研究。

致谢 感谢高能同步辐射光源国家重大科技基础设施项目的支持。感谢高压线站全体工作人员以及 HEPS 线站部光学系统、光机系统、控制系统和通用机械系统等对线站建设过程中的支持与配合。感谢上海光源、合肥光源、APS、SPRING-8、ESRF、PETRA III 和 NSLS II 等光源相关线站科学家的支持和帮助。感谢国内外高校及科研院所用户代表对线站建设和试运行期间的建议和支持。感谢 HEPS 国际顾问委员会对线站布局定位的意见和提议。

参考文献

- [1] BASSETT W A. Diamond anvil cell, 50th birthday [J]. *High Pressure Research*, 2009, 29(2): 163–186.
- [2] PICKARD C J, ERREA I, EREMETS M I. Superconducting Hydrides Under Pressure [J]. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 2020, 11: 57–76.
- [3] MAO H-K, CHEN X-J, DING Y, et al. Solids, liquids, and gases under high pressure [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2018, 90(1): 015007.
- [4] MAO H-K, CHEN B, CHEN J, et al. Recent advances in high-pressure science and technology [J]. *Matter and Radiation at Extremes*, 2016, 1(1): 59–75.
- [5] SINOGEIKIN S V, SMITH J S, ROD E, et al. Online remote control systems for static and dynamic compression and decompression using diamond anvil cells [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2015, 86(7): 072209.
- [6] JENEI Z, CYNN H, VISBECK K, et al. High-temperature experiments using a resistively heated high-pressure membrane diamond anvil cell [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2013, 84(9): 095114.
- [7] IMMOOR J, MARQUARDT H, MIYAGI L, et al. An improved setup for radial diffraction experiments at high pressures and high temperatures in a resistive graphite-heated diamond anvil cell [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2020, 91(4): 045121.
- [8] YAN J, DORAN A, MACDOWELL A A, et al. A tungsten external heater for BX90 diamond anvil cells with a range up to 1700 K [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2021, 92(1): 013903.
- [9] MENG Y, SHEN G, MAO H K. Double-sided laser heating system at HPCAT for in situ X-ray diffraction at high pressures and high temperatures [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2006, 18(25): S1097.
- [10] MEZOUAR M, GIAMPAOLI R, GARBARINO G, et al. Methodology for in situ synchrotron X-ray studies in the laser-heated diamond anvil cell [J]. *High Pressure Research*, 2017, 37(2): 170–180.
- [11] FEDOTENKO T, DUBROVINSKY L, APRILIS G, et al. Laser heating setup for diamond anvil cells for in situ synchrotron and in house high and ultra-high pressure studies [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2019, 90(10): 104501.
- [12] 王碧涵, 李冰, 刘旭强, 等. 毫秒时间分辨同步辐射 X 射线衍射和高压快速加载装置及应用 [J]. *物理学报*, 2022, 71(10): 100702.

- [13] 苏磊, 杨国强. 动态压力加载/卸载装置 dDAC 及原位表征技术研究进展 [J]. 高压物理学报, 2021, 35(6): 060102.
- [14] 王毫, 赵婷婷, 李梅, 等. 微秒到秒时间尺度的高压相变动力学和物性研究: 回顾、进展及展望 [J]. 高压物理学报, 2024, 38(3): 030101.
- [15] CHENG H, ZHANG J, LI Y, et al. A convenient dynamic loading device for studying kinetics of phase transitions and metastable phases using symmetric diamond anvil cells [J]. High Pressure Research, 2018, 38(1): 32–40.
- [16] SHEN G, MAO H K. High-pressure studies with x-rays using diamond anvil cells [J]. Reports on Progress in Physics, 2017, 80(1): 016101.
- [17] 刘景. 同步辐射高压衍射技术 [J]. 高压物理学报, 2020, 34(5): 050103.
- [18] SUTTON S R, RIVERS M L, CHARITON S, et al. GeoSoilEnviroCARS (Sector 13) at the Advanced Photon Source: a comprehensive synchrotron radiation facility for Earth science research at ambient and extreme conditions [J]. Physics and Chemistry of Minerals, 2022, 49(8): 32.
- [19] BOMMANAVAR A, CHOW P, FERRY R, et al. Overview of HPCAT and capabilities for studying minerals and various other materials at high-pressure conditions [J]. Physics and Chemistry of Minerals, 2022, 49(9): 36.
- [20] KUNZ M, ARMSTRONG K, BARNARD H, et al. In situ X-ray and IR probes relevant to Earth science at the Advanced Light Source at Lawrence Berkeley Laboratory [J]. Physics and Chemistry of Minerals, 2024, 51(2): 15.
- [21] MEZOUAR M, GARBARINO G, BAUCHAU S, et al. The high flux nano-X-ray diffraction, fluorescence and imaging beamline ID27 for science under extreme conditions on the ESRF Extremely Brilliant Source [J]. High Pressure Research, 2024, 44(3): 171–198.
- [22] GARBARINO G, HANFLAND M E, GALLEGO-PARRA S, et al. Extreme conditions X-ray diffraction and imaging beamline ID15B on the ESRF extremely brilliant source [J]. High Pressure Research, 2024, 44(3): 199–216.
- [23] LIERMANN H-P, KONOPKOVA Z, MORGENROTH W, et al. The Extreme Conditions Beamline P02.2 and the Extreme Conditions Science Infrastructure at PETRA III [J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2015, 22(4): 908–924.
- [24] HIRAO N, KAWAGUCHI S I, HIROSE K, et al. New developments in high-pressure X-ray diffraction beamline for diamond anvil cell at SPring-8 [J]. Matter and Radiation at Extremes, 2020, 5(1): 018403.
- [25] PENA R B, DA SILVEIRA R A, HIPPLER G, et al. EMA beamline at Sirius: A versatile platform to probe glass and glass ceramics under extreme thermodynamic conditions [J]. International Journal of Applied Glass Science, 2024, 15(4): 331–341.
- [26] 杨科, 蒋升, 闰帅, 等. 上海同步辐射光源高压相关线站概述 [J]. 高压物理学报, 2020, 34(5): 050102.
- [27] RAIMONDI P, BENABDERRAHMANE C, BERKVENS P, et al. The Extremely Brilliant Source storage ring of the European Synchrotron Radiation Facility [J]. Communications Physics, 2023, 6(1): 82.
- [28] KERBY J. The Advanced Photon Source Upgrade: A Brighter Future for X-Ray Science [J]. Synchrotron Radiation News, 2023, 36(4): 26–27.
- [29] BAEV K, BAGSCHIK K, BARTOLINI R, et al. X-Ray Science at DESY: Upgrade Programs for the User Facilities FLASH and PETRA III [J]. Synchrotron Radiation News, 2024, 37(1): 4–11.
- [30] TANAKA H, WATANABE T, ABE T, et al. Green upgrading of SPring-8 to produce stable, ultrabright hard X-ray beams [J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2024, 31(6): 1420–1437.
- [31] JIAO Y, LI M, HE P, et al. Design and commissioning of the High Energy Photon Source [J]. AAPPs Bulletin, 2026, 36(1): 3.
- [32] 李晓东, 袁清习, 徐伟, 等. 第四代高能同步辐射光源 HEPS 及高压相关线站建设 [J]. 高压物理学报,

- 2020, 34(5): 050101.
- [33] GONG Y, DONG W, YANG D, et al. Optical Design and Initial Commissioning of the High-Pressure Beamline ID31 at the High Energy Photon Source [J]. Photon Science, 2026.
- [34] FEI Y, RICOLLEAU A, FRANK M, et al. Toward an internally consistent pressure scale [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2007, 104(22): 9182–9186.
- [35] MAO H K, XU J, BELL P M. Calibration of the ruby pressure gauge to 800 kbar under quasi-hydrostatic conditions [J]. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 1986, 91(B5): 4673–4676.
- [36] AKAHAMA Y, KAWAMURA H. Pressure calibration of diamond anvil Raman gauge to 310 GPa [J]. Journal of Applied Physics, 2006, 100(4): 043516.
- [37] SYASSEN K. Ruby under pressure [J]. High Pressure Research, 2008, 28(2): 75–126.
- [38] YUE B, ZHONG W, SHU H, et al. Structure and superconductivity in a ternary selenide PbSnSe₂ alloy of three-dimensional PbSe and two-dimensional SnSe under pressure [J]. Physical Review B, 2026, 114: 074502.
- [39] RIGAKU. Single crystal diffraction software CrysAlisPro [J]. Rigaku Journal, 2016, 32(2): 4.
- [40] DE NOLF W, HUDER L, SVENSSON O, et al. EWOKS: An Extensible WORKflow System [J]. Synchrotron Radiation News, 2024, 37(6): 9–15.
- [41] SINGH A K. The lattice strains in a specimen (cubic system) compressed nonhydrostatically in an opposed anvil device [J]. Journal of Applied Physics, 1993, 73(9): 4278–4286.
- [42] 李强, 林鲲, 邢献然. 基于全散射技术局域结构确定与凝聚态物质 [J]. 化学进展, 2020, 32(8): 1219 – 1230.
- [43] CHAPMAN K W, CHUPAS P J, HALDER G J, et al. Optimizing high-pressure pair distribution function measurements in diamond anvil cells [J]. Journal of Applied Crystallography, 2010, 43(2): 297–307.
- [44] JUHAS P, DAVIS T, FARROW C L, et al. PDFgetX3: a rapid and highly automatable program for processing powder diffraction data into total scattering pair distribution functions [J]. Journal of Applied Crystallography, 2013, 46(2): 560–566.
- [45] GAO Y, CHEN W, LIU Q, et al. Decoupling Structural and Electronic Drivers of Superconductivity in Tetragonal La₃Ni₂O_{7+δ} [J]. Journal of the American Chemical Society, 2026.
- [46] DUBROVINSKAIA N, DUBROVINSKY L. Whole-cell heater for the diamond anvil cell [J]. Review of Scientific Instruments, 2003, 74(7): 3433–3437.
- [47] LAI X, ZHU F, ZHANG J S, et al. An Externally-Heated Diamond Anvil Cell for Synthesis and Single-Crystal Elasticity Determination of Ice-VII at High Pressure-Temperature Conditions [J]. Journal of Visualized Experiments, 2020, 160: e61389.
- [48] MENDOZA A S J, MARQUARDT H, HUSBAND R J, et al. A resistively-heated dynamic diamond anvil cell (RHdDAC) for fast compression x-ray diffraction experiments at high temperatures [J]. Review of Scientific Instruments, 2020, 91(7): 073906.
- [49] ANZELLINI S, BOCCATO S. A Practical Review of the Laser-Heated Diamond Anvil Cell for University Laboratories and Synchrotron Applications [J]. Crystals, 2020, 10(6): 459.
- [50] HRUBIAK R, SMITH J S, SHEN G. Multimode scanning X-ray diffraction microscopy for diamond anvil cell experiments [J]. Review of Scientific Instruments, 2019, 90(2): 025109.
- [51] ZAKARIA A, YEHYA S, FERTEY P, et al. Strain Evolution in Nanocrystals under High Pressure Tracked with Bragg Coherent X-ray Diffraction Imaging [J]. Nano Letters, 2026, 26(14): 4807–4814.
- [52] HUSBAND R J, HAGEMANN J, O'BANNON E F, et al. Simultaneous imaging and diffraction in the dynamic diamond anvil cell [J]. Review of Scientific Instruments, 2022, 93(5): 053903.
- [53] MORARD G, MEZOUAR M, BAUCHAU S, et al. High efficiency multichannel collimator for structural studies of liquids and low-Z materials at high pressures and temperatures [J]. Review of Scientific

- Instruments, 2011, 82(2): 023904.
- [54] JI C, LI B, LIU W, et al. Ultrahigh-pressure isostructural electronic transitions in hydrogen [J]. *Nature*, 2019, 573(7775): 558–562.
- [55] MORARD G, HERNANDEZ J-A, GUARGUAGLINI M, et al. In situ X-ray diffraction of silicate liquids and glasses under dynamic and static compression to megabar pressures [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2020, 117(22): 11981–11986.
- [56] YANG W, HUANG X, HARDER R, et al. Coherent diffraction imaging of nanoscale strain evolution in a single crystal under high pressure [J]. *Nature Communications*, 2013, 4(1): 1680.
- [57] WANG B, PAKHOMOVA A, KHANDARKHAEVA S, et al. Resolving the pressure induced ‘self-insertion’ in skutterudite CoSb_3 [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2025, 1017: 179020.
- [58] HIRAO N, OHISHI Y. X-ray focusing to 62 keV by compound refractive lenses for high-pressure x-ray diffraction [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2022, 93(8): 083908.
- [59] GLAZYRIN K, KHANDARKHAEVA S, FEDOTENKO T, et al. Sub-micrometer focusing setup for high-pressure crystallography at the Extreme Conditions beamline at PETRA III [J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2022, 29(3): 654–663.
- [60] KONOPKOVA Z, MORGENROTH W, HUSBAND R, et al. Laser heating system at the Extreme Conditions Beamline, P02.2, PETRA III [J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 2021, 28(6): 1747–1757.

An Overview of the Capabilities of the High-Pressure Beamline at the High Energy Photon Source

ZHANG Fei¹, DONG Weiwei¹, YANG Dongliang¹, GONG Yu¹, LI Yanchun¹,
JIANG Jiayue^{1,2}, WANG Yushuang^{1,2}, LI Xiaodong^{1,*}

(1. *Institute of High Energy Physics, Chinese Academic Sciences, Beijing 100049, China;*

2. *University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)*

Abstract: The high-pressure beamline at High Energy Photon Source (HEPS) is designed for structural studies of matter under extreme conditions. It primarily employs X-ray diffraction/scattering methods and combines micro- and nanometer-sized beams with diamond anvil cell techniques. The beamline is equipped with an in-vacuum undulator and liquid-nitrogen cooled Si(111)/Si(220) double-crystal monochromator, providing X-rays over an energy range of 20~75 keV. To meet the requirements of micrometer- and submicrometer-scale experiments, two focusing schemes based on compound refractive lenses and advanced Kirkpatrick–Baez mirrors are adopted. Benefiting from the low emittance, high brightness, and high coherence of the fourth-generation synchrotron source, the focused X-ray beam size better than 5 μm and 200 nm at the corresponding positions can be realized, with a maximum photon flux exceeding 1×10^{13} photons/s. To accommodate different experimental methods and focusing configurations, the experimental station comprises a general-purpose platform, a laser-heating platform, and a sub-micrometer platform. The general-purpose platform additionally incorporates low-temperature, high-temperature, and rapid-loading sample environment systems. The beamline supports a range of in-situ structural characterization methods, including powder (polycrystalline), single-crystal, and radial X-ray diffraction, as well as atomic pair

distribution function measurements. This paper presents an overview of the beamline's main performance parameters and methodological commissioning progress, demonstrates the capabilities of various experimental methods through application examples, and provides prospect for future developments. The beamline is expected to support broad multidisciplinary applications and contribute to the advancement of high-pressure science and technology in China.

Keywords: synchrotron radiation source; high pressure beamline; diamond anvil cell; X-ray diffraction

最新录用，
非最终出版稿