

尊敬的科学指南针用户：

您好！

感谢您选择科学指南针，指南针自成立以来，在大家的信任和支持下不断前进，在专业服务科研人的道路上迈出一步步扎实的步伐。

科学指南针，秉承着科研资源开放共享的宗旨，一直在整合全国优质开放共享测试资源，为科研党们提供优质、高效的分析测试服务，从原有的材料测试，扩展到了生物实验外包、模拟计算、科研绘图、论文润色等各类科研服务。

其中100%硕士/博士学历的实验对接服务人员，是我们保障优质服务的信心所在；遍布全国的服务点和高校服务网络，让我们最合理地调配仪器资源。我们不断死磕自己，只为给科研人提供更好的服务，您为科研，我们为您！

为方便大家拿到数据后，更好的分析和处理数据，对本次测试的仪器及数据说明如下：

**测试名称：** BET

**仪器型号：** 美国麦克 Tristar II 3020

**数据格式简述：** 数据为原始数据，PDF格式为仪器导出测试报告，EXCEL表格或TXT文本文档为原始数据（可自行作图使用，与PDF的图一一对应）。

#### BET通用数据说明

常用名词：

$P_0$  吸附温度下吸附质的饱和蒸气压

$P/P_0$  相对压力

Quantity Absorbed 吸附量，STP

$V_m$  单分子层饱和吸附量，STP

C BET方程常数

t 吸附层厚度

D 孔径

dV 孔容增量

dD 孔径增量

dV/dD 孔径分布微分统计

dV/dlogD 孔径分布微分统计（取对数）

Cumulative Pore Volume 累积孔容

Incremental Pore Volume 增加的孔容

me

me

me

#### 康塔测试报告解读：

针对PDF数据，说明如下：

报告的首页：可以看到仪器型号，样品质量，吸附质以及测试温度等信息。

#### 仪器型号

Quantachrome?ASiQwin? Automated Gas Sorption Data Acquisition and Reduction  
? 1994-2017, Quantachrome Instruments  
version 5.21



Analysis		Report	
Operator:	指南针测试	Operator:	科学指南针
Sample ID:	0144-11	Filename:	20200915-2009084203-1.qps
Sample Desc:		Comment:	
Sample Weight:	0.1271g	Instrument:	Autosorb iQ Station 1
Approx. Outgas Time:	4.5 hrs	Final Outgas Temp.:	300 度
Analysis gas:	Nitrogen	Non-Ideality:	6.58e-05 1/Torr
Analysis Time:	9.43 min	Bath temp.:	77.35 K
Analysis Mode:	Standard		
VoidVol. Mode:	He Measure	Cold Zone V:	9.18757 cc
		Extended info:	Available
		CellType:	9mm w/o rod
		VoidVol Remeasure:off	
		Warm Zone V:	14.6641 cc

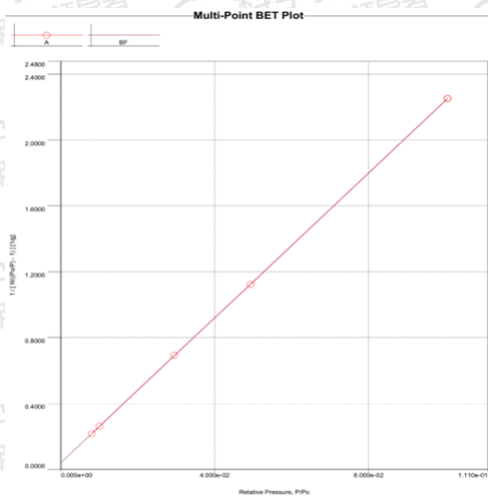
只测比表面积报告：

只测比表面积模式就只有比表面积数值和BET方程的相关参数，没有吸脱附曲线和孔径分布的数据等。

#### MBET summary

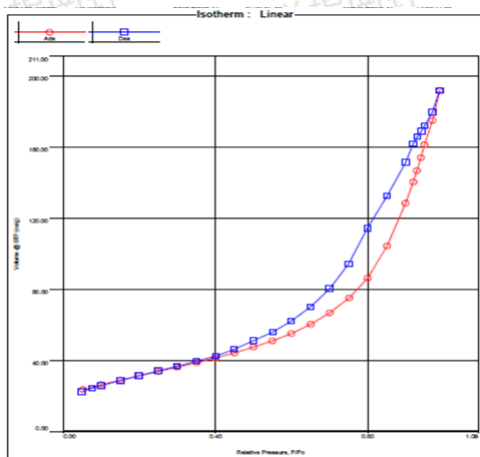
Slope = 22.019 1/g  
Intercept = 3.969e-02 1/g  
Correlation coefficient, r = 0.999994  
C constant = 555.839

**Surface Area = 157.875 m<sup>2</sup>/g 比表面积**



介孔报告：

等温吸脱附曲线Isotherm：测试过程为先吸附后脱附，从图中可以看到不同压力点对应的样品的吸附量。



#### Isotherm

##### 相对压力

##### 吸附量

Relative Pressure

Volume @ STP  
[cc/g]

5.20560e-02 23.5074  
1.00247e-01 28.2471  
1.50439e-01 28.8354  
2.00033e-01 31.2671

Relative Pressure

Volume @ STP  
[cc/g]

8.51089e-01 104.2738  
8.99378e-01 128.3267  
9.19972e-01 140.2256  
9.29363e-01 146.5701

Relative Pressure

Volume @ STP  
[cc/g]

7.48719e-01 94.1823  
7.00217e-01 80.1783  
6.49531e-01 69.9502  
5.98848e-01 61.9449

比表面积：一般看Surface Area这个值，也可以看到BET方程的相关参数。

#### MBET summary

Slope = 30.623 1/g  
Intercept = 2.953e-01 1/g  
Correlation coefficient, r = 0.999970  
C constant = 104.699

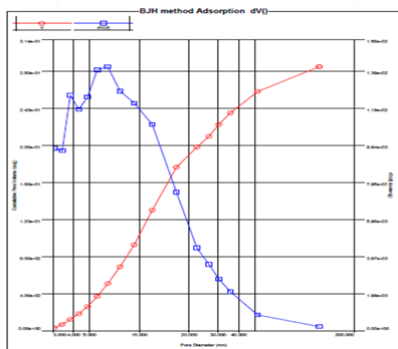
Surface Area = 112.639 m<sup>2</sup>/g 比表面积

BJH数据：可以分别得到吸附和脱附的介孔和大孔部分的比表面积、孔容、孔径等数据。BJH孔径分布分为吸附孔径分布和脱附孔径分布。一般来说，孔径分布图应该以脱附曲线为准（desorption），查看dV/dD和dV/dlogD图，但是如果脱附曲线孔径分布出现3.8 nm的假峰，则要以吸附曲线（adsorption）的数据为准。

吸附

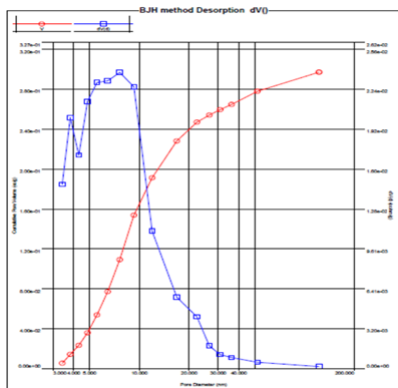
### BJH adsorption summary

Surface Area = 97.374 m<sup>2</sup>/g  
Pore Volume = 0.285 cc/g  
Pore Diameter Dv(d) = 6.443 nm



### BJH desorption summary

Surface Area = 126.641 m<sup>2</sup>/g  
Pore Volume = 0.297 cc/g  
Pore Diameter Dv(d) = 7.614 nm



孔容和平均孔径数据：

### Volume/Area summary

#### Surface Area Data

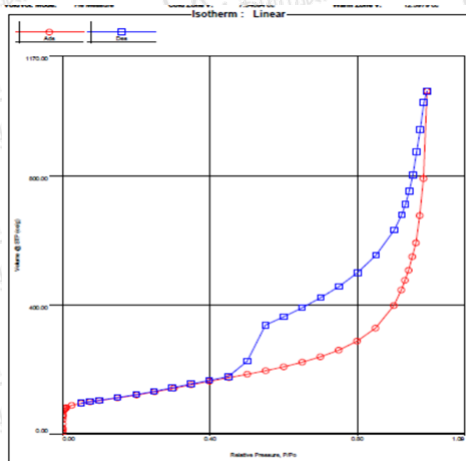
#### Pore Volume Data 孔容

Total pore volume for pores with Diameter less than 180.49 nm at P/Po = 0.989363 ..... 2.965e-01 cc/g

#### Pore Size Data 孔径

Average pore Diameter ..... 1.053e+01 nm

全孔报告：全孔报告除了包含介孔报告中的所有数据，还会包含样品中微孔这一部分数据，含有微孔的样品等温吸脱附曲线低压区会有比较高的吸附量。



孔径分布：全孔报告包括的孔径分布图除了 BJH 数据，还有 HK、DFT 数据等。

**HK 法孔径分布：**HK 方法可以得到微孔部分的孔径分布。横坐标为孔径一般用 Pore width 或 Pore Diameter 表示，单位为 nm；纵坐标一般用  $dV/d(w)$  或  $dV/d(D)$  表示，纵坐标最高点对应的孔径为微孔范围内样品最集中的孔的尺寸。Excel 中有原始数据，可以用 origin 作图。

Pore width	$dV()$
0.3125	0.0108
0.3175	0.01085
0.3225	0.01091
0.3275	0.01099
0.3325	0.0111
0.3375	0.01123
0.3425	0.01141
0.3475	0.01162
0.3525	0.0119
0.3575	0.01224
0.3625	0.01267

**DFT 法孔径分布：**DFT 方法可以同时得到微孔和介孔部分的孔径分布图。横坐标为孔径一般用 Pore width 或 Pore Diameter 表示，单位为 nm；纵坐标一般用  $dV/d(w)$  或  $dV/d(D)$  表示。纵坐标最高点对应的孔径为样品最集中的孔的尺寸。Excel 中有原始数据，可以用 Origin 作图。

Pore width	$dV(d)$
0.484	4.58E-01
0.504	5.43E-01
0.524	6.19E-01
0.545	5.77E-01
0.567	4.54E-01
0.59	2.89E-01
0.614	1.35E-01
0.64	3.32E-02
0.666	0.00E+00
0.694	0.00E+00
0.723	0.00E+00
0.753	0.00E+00

#### 麦克测试报告解读：

针对 PDF 数据，说明如下：

报告的首页：可以看到仪器型号，样品质量，吸附质以及测试温度等信息。

仪器型号

ASAP 2460 3.00

ASAP 2460 Version 3.00  
Unit 1 Port 4

Page 1 of 31

Sample: BET-A-1  
Operator: YG  
Submitter: YG

Started: 2020/1/20 18:54:47  
Completed: 2020/1/21 1:26:00  
Report time: 2020/1/21 1:36:58

Analysis adsorptive: N<sub>2</sub> 吸附质  
Analysis bath temp.: 77.300 K 测试温度  
Thermal correction: No  
Ambient free space: 17.4141 cm<sup>3</sup> Measured  
Equilibration interval: 15 s  
Sample density: 1.000 g/cm<sup>3</sup>

Sample mass: 0.1188 g 样品质量  
Analysis free space: 48.7173 cm<sup>3</sup>  
Low pressure dose: None  
Automatic degas: No

只测比表面积报告:

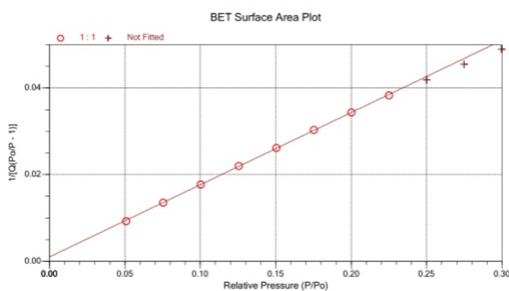
只测比表面积模式就只有比表面积数值和BET方程的相关参数，没有吸脱附曲线和孔径分布的数据等。

Summary Report

Surface Area

Single point surface area at P/Po = 0.225051178: 25.5888 m<sup>2</sup>/g

BET Surface Area: 25.9550 m<sup>2</sup>/g



介孔报告:

Summary Report

Surface Area 比表面积

Single point surface area at P/Po = 0.140573410: 56.4184 m<sup>2</sup>/g 单点法比表面积

BET Surface Area: 58.8053 m<sup>2</sup>/g BET 比表面积 (多点法)

t-Plot Micropore Area: 16.5177 m<sup>2</sup>/g 微孔比表面积

t-Plot external surface area: 43.2776 m<sup>2</sup>/g t-plot 法外比表面积

BJH Adsorption cumulative surface area of pores  
between 1.7000 nm and 300.0000 nm width: 47.1044 m<sup>2</sup>/g

BJH Desorption cumulative surface area of pores  
between 1.7000 nm and 300.0000 nm width: 47.6218 m<sup>2</sup>/g



### Pore Volume 孔容

Single point adsorption total pore volume of pores  
less than 170.8706 nm width at P/Po = 0.988657138: 0.434336 cm<sup>3</sup>/g 单点法孔容

t-Plot micropore volume: 0.006752 cm<sup>3</sup>/g t-plot 法微孔孔容

BJH Adsorption cumulative volume of pores  
between 1.7000 nm and 300.0000 nm width: 0.439391 cm<sup>3</sup>/g

BJH Desorption cumulative volume of pores  
between 1.7000 nm and 300.0000 nm width: 0.436817 cm<sup>3</sup>/g

### Pore Size 孔径

Adsorption average pore diameter (4V/A by BET): 29.1351 nm

平均孔径

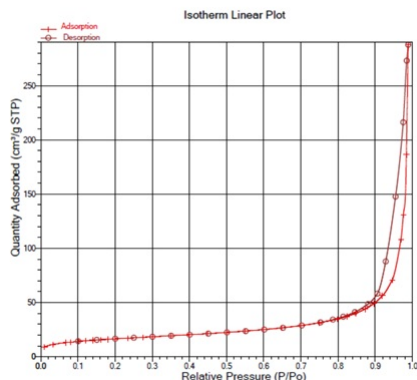
Desorption average pore diameter (4V/A by BET): 14.0224 nm

BJH Adsorption average pore width (4V/A): 35.3121 nm

介孔平均孔径

BJH Desorption average pore width (4V/A): 36.9425 nm

等温吸脱附曲线Isotherm: 测试过程为先吸附后脱附，从图中可以看到不同压力点对应的样品的吸附量。



### 等温吸脱附曲线

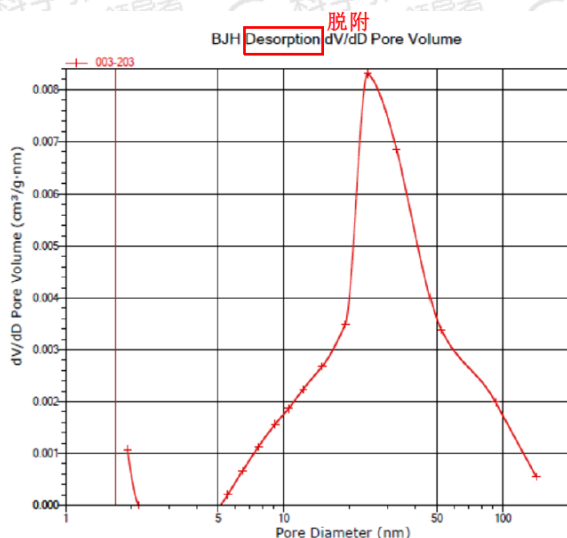
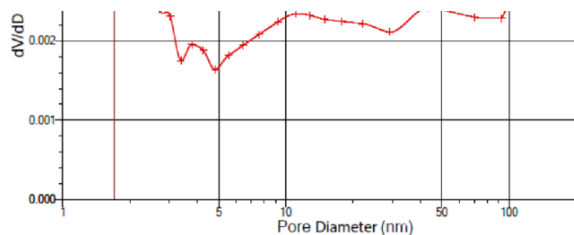
#### Isotherm Tabular Report

Relative Pressure (P/Po)	Absolute Pressure (mmHg)	Quantity Adsorbed (cm <sup>3</sup> /g STP)	Elapsed Time (h:min)	Saturation Pressure (mmHg)
0.055204006	42.865631	4.3992	01:09	776.545105
0.085255859	66.198692	4.9350	01:13	776.494934
0.120391287	93.481461	5.4394	01:15	776.470886
0.155311622	120.594147	5.8784	01:16	776.480286
0.190102207	147.614990	6.2674	01:18	776.465698
0.225165701	174.839325	6.6390	01:19	776.503296
0.260165055	202.063675	6.9892	01:20	776.491821
0.295165055	229.288025	7.3394	01:22	776.530020

BJH法孔径分布: 可以分别得到吸附和脱附的介孔和大孔部分的比表面积、孔容、孔径等数据。BJH孔径分布分为吸附孔径分布和脱附孔径分布。横坐标为孔径，纵坐标一般用dV/dD或dV/dlogD表示，但是如果脱附曲线孔径分布出现3.8 nm的假峰，则要以吸附曲线（adsorption）的数据为准。

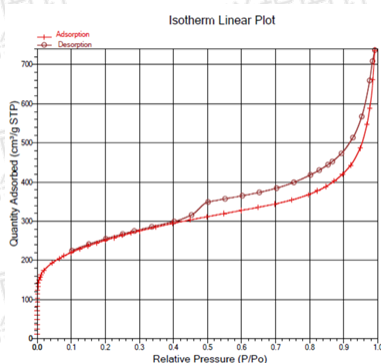
### BJH Adsorption dV/dD Pore Volume





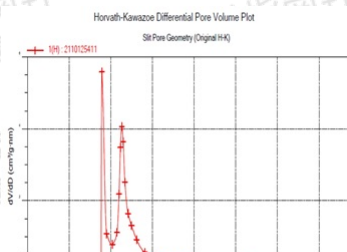
#### 全孔报告:

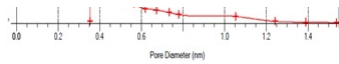
全孔报告除了包含介孔报告中的所有数据，还会包含样品中的微孔这一部分数据，含有微孔的样品等温吸脱附曲线低压区会有比较高的吸附量。



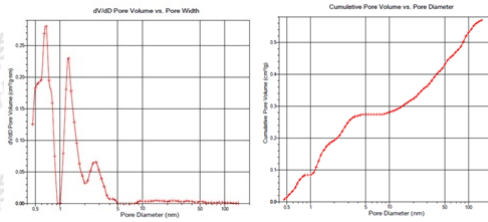
孔径分布：全孔报告包括的孔径分布图除了BJH数据，还有HK、DFT数据等。

**HK法孔径分布：**HK方法可以得到微孔部分的孔径分布。纵坐标最高点对应的孔径为微孔范围内样品最集中的孔的尺寸。





**DFT法孔径分布：**DFT方法可以同时得到微孔和介孔部分的孔径分布图。纵坐标最高点对应的孔径为样品最集中的孔的尺寸。



#### 常用软件与资料下载

温馨提示：以下链接无法在PDF里直接点开，需要您把对应链接复制粘贴到浏览器的搜索栏里打开哦

Origin软件：

<https://shijianjia.oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/数据解读文档/BET/Origin 8 专业版破解版下载.zip>

常用资料：

<https://shijianjia.oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/数据解读文档/BET/常用资料.rar>

#### 常见问题与解答

**Q：BET就是比表面吗？计算比表面积的方法有多少种？**

BET法只是比表面分析方法中的一种理论。

Langmuir 第一次揭示了吸附的本质，其方法是单分子层吸附理论，适合于以微孔为主的样品分析。

BET 理论发表于 1938 年，其正式名称是多分子层吸附理论，是对 Langmuir 理论修正。BET 是该理论的三个提出者姓氏的首字母缩写。由于 BET 法适合大部分样品，目前成为流行的比表面分析方法。但 BET 法并不适用于所有样品，因此按介孔材料的分析方法分析微孔材料时，由物理吸附分析仪自动生成 BET 比表面值是错误的。ISO9277-2010 和 IUPAC 都对含微孔材料的 BET 比表面分析方法及判断 BET 结果的方法做出了规定。

不同的理论模型给出的计算结果是不同的，所以要根据理论模型的假设条件，选择适合样品性质的理论模型。大多数理论模型是根据发明人的名字或缩写命名的，能计算出比表面的理论模型包括 Langmuir, BET, BJH, DR 和 NLDFT。

**Q：吸附脱附曲线不闭合**

1. 材料表面存在特殊的基团和化学性能，导致吸附的气体分子无法完全脱离，即材料对吸附质有较强作用，导致吸附脱附会存在一定的不闭合程度；
2. 材料自身的比表面较小，一般吸附脱附闭合程度较差；
3. 称样量问题，称样量太少，容易造成测量不准。也会出现此类情况；
4. 样品前处理问题，可能是材料中的杂质，尤其是水，在脱气过程中没有充分除去，造成吸附是负的；
5. 设备漏气，仪器真空系统不保压造成。

碳材料的孔结构比较复杂，容易出现柔性孔或者墨水瓶形状孔，气体吸附之后孔口直径收缩，导致吸附上的气体不易脱附，容易导致吸附脱附曲线不闭合。

**Q：吸附脱附曲线交叉**

1. 样品自身的原因，本身的吸附值就比较小，容易出现交叉的现象
2. 脱气温度和时间不合理
3. 设备漏气

**Q：比表面积偏小，或跟预期不符**

1. 脱气温度和时间不合理，脱气不完全，造成比表面积偏小，或者脱气温度不合适，样品分解或变质；
2. 跟样品本身的孔型有关系，具体说明如下：  
分析孔径分布图：a. 本身没有孔，无孔材料，无吸附，自然测不到较大比表面积；b. 材料主要的孔径分布为大孔，不含微孔和介孔，比表面积自然小；一般而言微孔较多的材料比表面积相对大，介孔次之，大孔比表面积较小；  
孔径分布看：dV/dD 或 dV/dW  
大孔孔径分布可参看 NLDFT（但是 BET 测大孔误差较大，大孔用压汞法测试较好）；  
微孔孔径分布可参看 HK；  
介孔孔径分布参看 BJH；  
BET 过小应该是跟材料本身的孔径分布有关系，这个仪器测试的结果一般不会有很大误差的，在仪器不存在问题的情况下，BET 的大小跟材料本身的孔径结构关系最大；
3. 测试所加样品量过少；
4. 计算所选的点与样品不匹配。



#### Q: 比表面积为负值

1. 样品自身的原因，可以看吸附等温线，没有吸附就会出现仪器误差的现象，吸附曲线乱串，吸附量特别低，也可能跑到负值出现吸附点，该类吸附几乎是可以忽略；
2. 测试所加样品量过少，造成总体的吸附值很低，出现误差；
3. 脱气温度和时间不合理，脱气不完全或者脱气温度过高对孔结构造成破坏。

#### Q: 仪器提示超出压力范围自动停止，报告中出现error

没有液氮了、蒸气压超过设定值、仪器故障、漏气、吸附气钢瓶没气了、仪器报错一般都会自动停止，虽然可以计算出比表面积，但一般来讲实际测得的比表面积比真实的小，出现该情况，具体可跟指南针对接老师沟通。

#### Q: 低压区无点或者点少？孔径分布图为什么不是从0开始？

一般孔径分布图是从开始有孔的地方出现数据，低压处无孔，则不会出现数据；而且孔径分布不会从0开始的，因为所有的物理吸附测试都是有吸附质的，而任何一种吸附质本身是有分子直径的，孔径分布数据理论上最小只能从吸附质的直径开始，而实际是比吸附质直径更大。

其它问题，如无法确定样品编号、缺少数据、测错样品等，请及时联系指南针工作人员。

以上如对实验结果有疑问，请尽快联系科学指南针工作人员或拨打400-831-0631，我们会尽快给您确认并解决，由于我们工作的失误给您带来的不便，我们深感抱歉！

#### 不会分析数据？

科学指南针现隆重推出旗下数据分析团队“铅笔解析”，可承接科研测试类数据分析，包括但不限于XRD、XPS、FTIR、TEM、单晶XRD、NMR、电化学等数据分析，未知物成分剖析和大数据/人工智能分析服务，如需购买对应分析服务，可致电400-831-0631，或直接咨询业务负责人杨老师13728082928（同微信）

大类	具体分类	分析项目名称	分析内容	报价	周期
测试数据分析	晶体结构分析类	XRD数据解析 (峰位+强度+R因子)	解析CIF文件，晶胞参数，WDF/COF数据解析，晶体可能化，含量分析，混排度，掺杂比，结晶度计算，定性分析，晶粒尺寸计算	150/样起	1-7天
		单晶解析	消除A/B/C类错误，解析晶体结构，精修等	一事一议	1-7天
		TEM数据解析	高分辨标定（晶相、晶面间距）、衍射的标定、图片处理、晶体质量量、高分辨像拟合等	200/样起	2-7天
	化学结构分析类	EDS数据解析	晶粒分析，取向分析	一事一议	2-7天
		NMR数据解析	化学位移的归属，定量分析，耦合常数分析，确认化学结构	200/图起	2-7天
		gc/ms/chems分析	解析得到产物结构，质谱转数途径，半定量分析	一事一议	2-7天
	光谱测试分析类	同步辐射数据解析	E/R空间图，小波变换，相位拟合，XANES近边谱拟合	200/样起	2-7天
		PDF数据解析	径向分布函数等	一事一议	2-7天
		XPS数据解析	全谱定性分析，分峰拟合，峰位/峰宽标定，自旋，元素/元素含量分析，俄歇谱拟合，角分辨数据，mapping数据	240/样起	1-7天
	交叉学科	红外光谱数据解析	标峰，识别官能团，蛋白二级结构分析，二维红外分析，分峰计算，主成分分析等	200/样起	1-7天
成分分析	其他	蛋白二硫键数据解析	蛋白二硫键结构分析	200/样起	1-8天
		电化学数据解析	EIS拟合，库伦效率计算，GITT数据解析	一事一议	1-9天
		红外数据解析	自由基分析，pH值，A值，根据图	一事一议	1-10天
	成分分析	未知成分分析	更多数据解析，联系老师13728082928，未知成分定量分析，未知物剖析，各种工业添加剂成分分析，化工废料，废料，塑料，树脂化工品等	一事一议	1-11天
		配方破解	商品配方破解，配方复制	一事一议	/
		失效分析	粘接失效，焊接失效，腐蚀分析，失效机理分析	一事一议	/
数据分析	科学计算	微分方程	数值积分(计算微分方程)，求解常微分方程(ODE)	一事一议	/
		优化	求解最优化问题	一事一议	/
		统计计算	假设检验，计算协方差矩阵、相关系数矩阵等	一事一议	/
	统计计算	聚类	聚类分析	一事一议	/
		统计图表	绘制热力图，雷达图，等高线图等复杂图表	一事一议	/
		神经网络	利用最近邻、决策树、支持向量机等模型解决数值预测和分类识别问题	一事一议	/
	人工智能	神经网络	利用人工神经网络模型解决数值预测和类型识别问题	一事一议	/
		深度学习			
		大数据分析			
		数据挖掘			

更多数据分析咨询杨老师 电话：13728082928（同微信）  
网址：<https://www.shiyanjia.com/analysis.html>

#### 科研绘图，助力科研成果呈现

一张精美达意的图片，胜过千言万语，我们可帮助您把千辛万苦做出的实验结果以最靓丽的方式呈献给别人。封面图，TOC，插图，科研动画，通通都能帮您解决，是您的优秀成果不被埋没的重要辅助，助您实现科研成果的精彩绽放。如需绘图服务，可致电400-831-0631，或直接咨询业务负责人燕老师（13625714087，同微信号）



## 模拟仿真，助力论文档次提升

基于量子力学或牛顿力学的第一性原理、密度泛函理论 (DFT)、分子动力学等方法, 可以对物理、化学、材料、生物研究体系进行建模计算, 从而得到其最优的几何构型、电子结构、热力学动力学等相关性质。科学指南针可提供几何构型、电子相关性质、动力/热力学相关性质、生物相关模拟、有限元模拟 (comsol) 等相关的模拟仿真服务。如需模拟计算服务, 可致电400-831-0631, 或直接咨询业务负责人谢老师 15210358385 (同微信)

[illegible]

杭州研趣信息技术有限公司