

# 嫦娥八号XRD/XRF原理样机设计及测试

章明远\*, 李 晖#

北京工业大学材料科学与工程学院, 北京

收稿日期: 2026年3月14日; 录用日期: 2026年4月8日; 发布日期: 2026年4月16日

## 摘 要

介绍了一种新的集成便携式仪器, 能够进行现场X射线衍射(XRD)和X射线荧光(XRF)测量。该仪器设计和开发的目的是优化仪器尺寸并且验证嫦娥8号(CE-8)中XRD/XRF光路及低功率实验条件下的可靠性, 并能够捕获XRF和XRD信息。同时进行XRD/XRF数据收集是通过使用SDD探测器和HPC探测器对X射线进行计数来实现的。从样品散射的射线光子作为能量和角度步长的函数。该仪器还配备了开发的软件TopMINI及商用软件XRS-FP2, 以便在数据收集中提供易于操作的操作, 并对材料进行完整和快速的衍射及荧光收集, 进行数据分析。

## 关键词

衍射仪, XRD, XRF, 数据采集, 数据分析

# Design and Testing of the Chang'e-8 XRD/XRF Prototype

Mingyuan Zhang\*, Hui Li#

School of Materials Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing

Received: March 14, 2026; accepted: April 8, 2026; published: April 16, 2026

## Abstract

A new integrated portable instrument is introduced, capable of performing on-site X-ray diffraction (XRD) and X-ray fluorescence (XRF) measurements. The instrument was designed and developed to optimize its size and to verify the reliability of the XRD/XRF optical path on Chang'e 8 (CE-8) under low-power experimental conditions, while being able to capture both XRF and XRD information. Simultaneous XRD/XRF data collection is achieved by using SDD detectors and HPC detectors to

\*第一作者。

#通讯作者。

count the X-rays from the sample, as a function of energy and angular steps. The instrument is also equipped with the developed software TopMINI and commercial software XRS-FP2 to provide user-friendly operation during data collection, and to enable complete and rapid diffraction and fluorescence data acquisition for material analysis.

## Keywords

Diffraction, XRD, XRF, Data Collection, Data Analysis

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

如今, 有大量的领域需要进行原位物相识别和定量分析: 例如, 材料科学、化学、物理学、地球科学、考古学和艺术材料, 以及工业界应用。例如环境检测, 产品质量检验、原材料检测、石油勘探、矿山等。X 射线荧光分析是一种非破坏性的多元素分析方法, 可以给出元素组成[1]。然而, 通常, 例如在矿物学分析中, 不仅需要元素信息, 还需要晶体结构信息。X 射线衍射是物相识别与鉴定非常强有力的工具。其发展已经有超过 100 年的历史。非常成熟与可靠。使用全谱拟合技术, 可比较准确地确定复杂混合物中存在的所有相及其含量[2]。因此, XRF 和 XRD 技术的组合构成了在多个研究领域中对材料进行完整表征的强大工具。该组合也非常适合月球岩石及月壤矿物组分及含量分析。但是 CE-8 要实现月球原位测试, 需要考虑整机的功耗, 重量及体积限制, 常规的 XRD/XRF 是无法直接应用的。而将两台实验室使用的常规 XRD 及 XRF 缩小到可以满足航天搭载要求, 是有巨大技术挑战的。本章介绍了一台在低功率条件下, 满足航天搭载尺寸及重量需求的小型 XRD/XRF 一体化原理样机的设计思路及研制过程。包括仪器的硬件及分析软件两大部分。

本文介绍了新型 XRD/XRF 仪器; 我们首先描述了基于掠入射式的反射式 X 光探测的硬件[3], 该光路主要是为了满足 CE-8 所搭载的探月车结构以及机械臂样品采集、研磨及传送的设计要求而选择的。接下来, 描述了用于仪器控制和自动化以及用于数据采集和分析的 TOPMINI 及 FP2 的使用。关于数据采集, XRD 选择二维 HPC 探测器, 它是一种新型 X 射线探测设备, 核心特点是“单光子直接计数 + 混合结构设计” [4], XRF 选用 SDD 探测器。最后, 作为对装置的测试, 将展示石英、IGG (模拟月壤) 及 NIST 610 获得的 XRD/XRF 实测数据。这些测试及定量分析表明, XRF/XRD 原理样机基本达到 CE-8 对 XRD 及 XRF 设备的技术指标。

## 2. 硬件

### 2.1. 仪器组成及光路设计

该仪器主要由一个 X 射线管、样品转台、HPC 探测器及 SDD 探测器组成。图 1 显示了仪器的主要部件的照片。我们使用的是紧凑型 X 射线管, 选用 Co 阳极; 光管额定功率 30 W, 额定工作电压 30 kV, 额定工作电流 1 mA。样品转台旋转速度 10 RPM, 右方黑色物体为 XRD 的二维 HPC 探测器, 样品上方为 XRF 的 SDD 探测器。

表 1 中列出了实验所用 X 射线源及两种探测器(HPC 探测器、SDD 探测器)的核心性能参数, 所有参数均为设备标准工作状态下的实测或出厂标定值, 为后续实验数据的可靠性提供设备性能支撑。

图2是光路设计图, 按照掠入射式光路设计, 光源S到样品中心O的距离设置为55 mm。样品中心O到探测器中心F的距离也设置为55 mm。以实现光束汇聚, 提高角度分辨率的目的。光源倾角设置为 $18^\circ$  ( $\angle SOM = 18^\circ$ )。探测器覆盖角度 $40^\circ$  ( $\angle BOA = 40^\circ$ )。

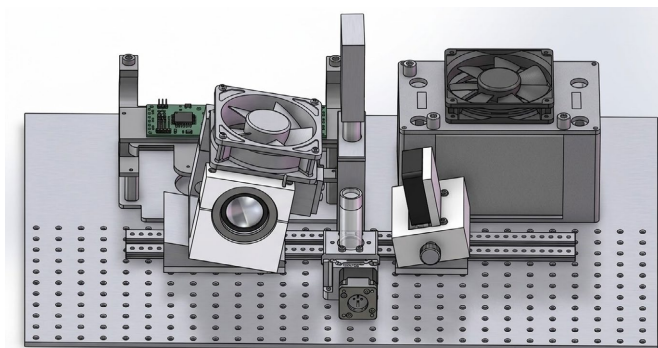


Figure 1. Instrument design model  
图1. 仪器设计模型

Table 1. Main parameters of instrument components  
表1. 仪器主要部件参数

设备名称	性能指标	具体参数
X 射线源	靶材	Co 靶
	额定功率	30 W (30 kV, 1 mA)
	工作功率	9 W (30 kV, 0.3 mA)
HPC 探测器	窗口尺寸	20 mm × 20 mm
	像素尺寸	256 × 256
	能量范围	5 keV~25 keV
SDD 探测器	能量分辨率(@5.9 keV)	约 130 eV

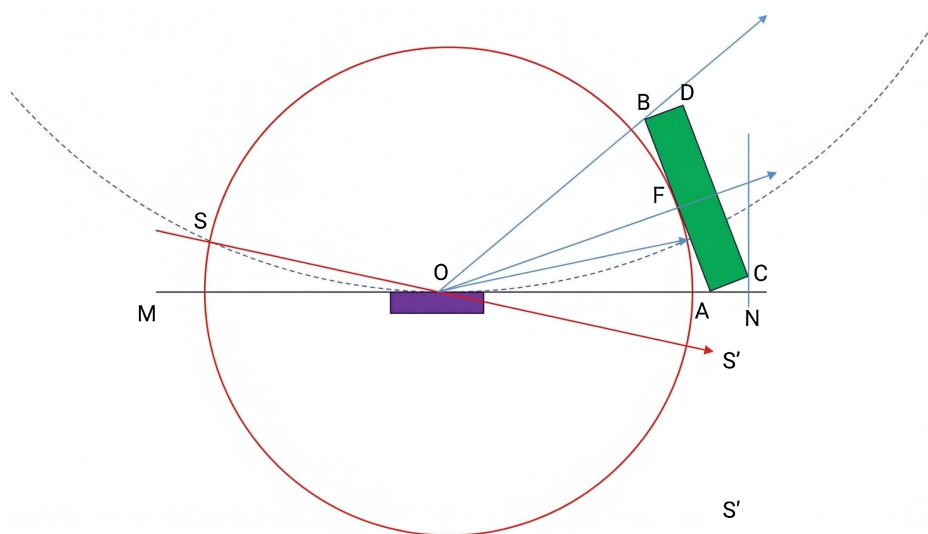


Figure 2. Optical path design diagram  
图2. 光路设计图

以常见的月壤矿物为例(如斜长石、辉石、钛铁矿), 其特征衍射峰多集中在  $2\theta = 20^\circ \sim 50^\circ$  区间内[5]。所以最终把衍射范围设定  $18^\circ$  到  $55^\circ$  的  $2\theta$  范围, 是为了覆盖目标样品中多数矿物的特征衍射峰。

## 2.2. 零部件选择

样品转台转速是 10 RPM, 它的主要功能是通过旋转提升样品, 实现晶面取向的均匀化, 最终解决择优取向、峰强不足和数据失真三大核心问题, 从而保证 X 射线衍射(XRD)测试数据的可靠性。选择 Co(钴)作为阳极靶材, 其特征波长为  $1.7903 \text{ \AA}$ , 主要目的在于避免 Fe 元素的荧光对 XRD 数据干扰, 因此特别适用于含铁样品的 XRD 分析, 如钢铁和铁矿石[6]。在狭缝选择上, 考虑到仪器体积的限制, 经过测试最终选定了  $0.2 \times 1.0 \text{ mm}$  的发散狭缝。HPC(混合像素光子计数探测器)作为一种新型 X 射线探测设备, 其核心特点是“单光子直接计数与混合结构设计”, 克服了传统 CCD 探测器在 CE-8 月面探测任务中所面临的必须制冷的局限(需要  $-55^\circ\text{C}$  至  $-60^\circ\text{C}$ ) [7], 这不仅增加了设备的体积、重量和功耗, 还无法满足月面极端环境下的原位探测需求。与之不同, HPC 探测器能够适配月壤的原位 XRD/XRF 分析, 满足“轻量化、低功耗”的要求, 并且能够耐受月面真空和低温( $-180^\circ\text{C}$ )环境[8], 快速、精准地探测月壤的矿物结构与元素组成, 为月球地质研究提供了重要的数据支持, 仪器的总质量约为 15 kg, 尺寸为  $25 \text{ cm} \times 17 \text{ cm} \times 20 \text{ cm}$ 。

## 3. 软件

### 3.1. TopMINI

仪器的操作控制由 TopMINI 自研软件进行, 且 XRD 部分由 TopMINI 进行数据分析, XRF 部分由软件 XRS-FP2 商业软件进行数据分析。

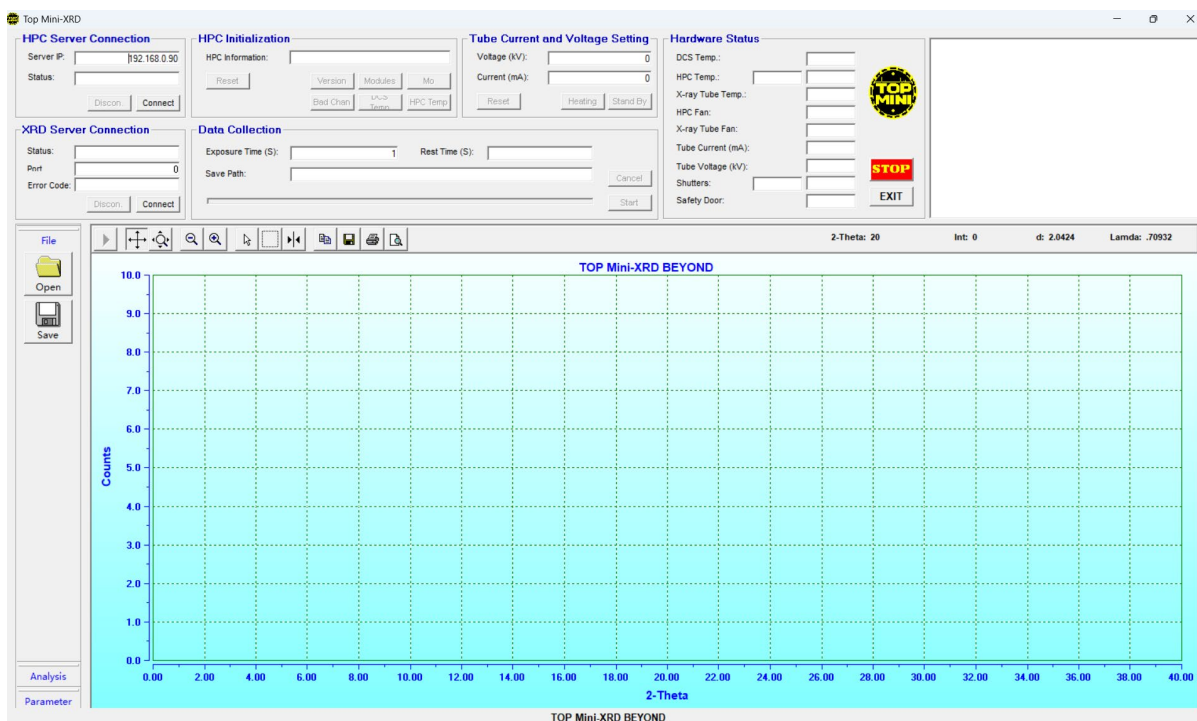


Figure 3. TopMINI main control interface

图 3. TopMINI 主控界面

图 3 是 TopMINI 的主控界面, TopMINI 软件主要用于 X-ray 粉末衍射仪的电压、电流及曝光时间等

硬件参数设置,同时完成 XRD 全流程的数据处理与分析工作,其主控界面主要分为两大功能区域,上半部分集成了与衍射仪硬件(包括探测器和衍射仪主板)的通讯功能,探测器通过 TCP/IP 协议通讯、衍射仪主板通过 USB 串口通讯,支持用户发送指令并查看衍射仪及探测器的实时状态。在成功建立与衍射仪的连接后,可在 40~50 kV 范围内设置 X 光管工作电压、1.0 mA 基准下调整工作电流,本实验中设置为 30 kv、0.3 mA,使工作功率维持在 9 W~10 W 左右,用以模拟 CE-8 真实工作状态的工作功率;参数选择设置完成后,TopMINI 将自动为 X 光管提供电压和电流支持,后续用户可设定样品数据文件的存储名称、存储位置,并配置实验数据的采集时间(如 600 秒),所有设置完成后点击“Start”按钮即可开始数据采集。数据采集过程中,TopMINI 会实时监控 X 光管温度、探测器温度、风扇运行状态、光闸状态及样品舱门位置等信息并在界面展示,一旦发现异常情况,软件会自动降低光管的电压和电流,防止辐射泄漏。数据采集完成后,TopMINI 还可实现物相识别和成分含量的分析功能,先通过几何校正、背景扣除、方位角积分将 2D 衍射数据转换为 1D 图谱,再基于 SQLite 数据库调取 ICDD PDF2.0 数据,通过提取衍射峰  $d$  值和强度并与标准数据比对的自动检索算法完成物相鉴定,该功能支持最多六种物相的识别分析;定量分析则基于衍射运动学理论,采用简化版全谱拟合法开展,先调取参比强度还原不同物相的真实衍射强度,解决数据库归一化强度不可比的问题,再选用适配实验室 X-ray 光源的 MTCH 峰型函数[9],通过最速下降算法对峰型参数、比例因子等相关参数迭代优化拟合,有效规避衍射峰重叠、实验条件差异导致的强度失真问题,最终依据实验实测衍射强度与数据库还原后绝对强度的比值,计算出各物相在混合物中的重量百分比,分析精度与 Fullprof、JADE 等国际主流软件基本一致。

### 3.2. XRS-FP2

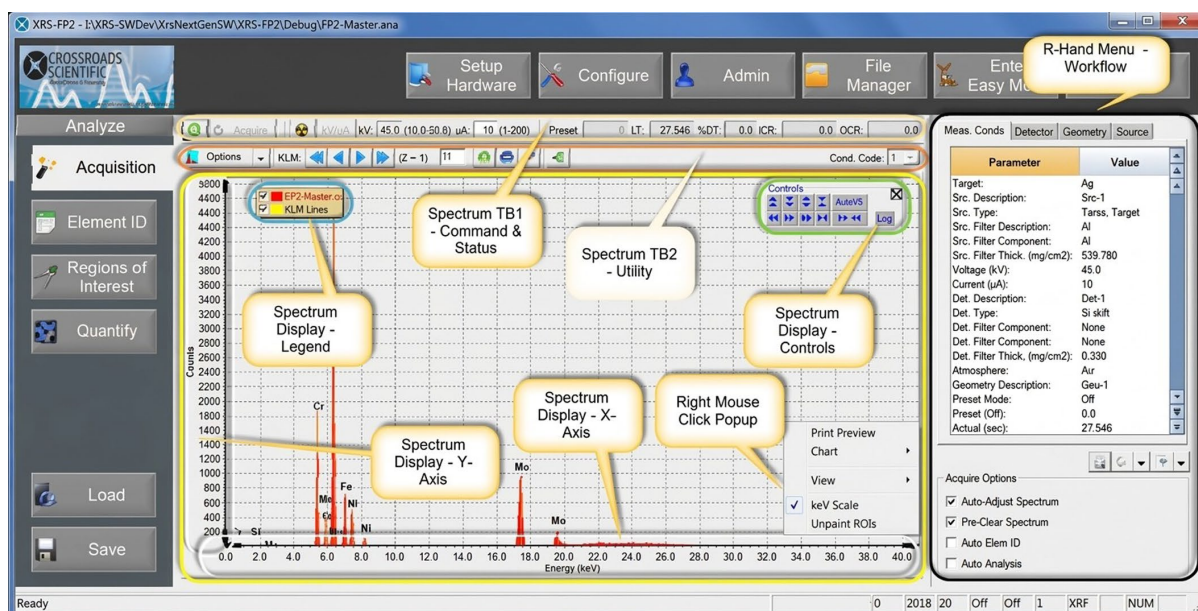


Figure 4. XRS-FP2 user interface window

图 4. XRS-FP2 用户界面窗口

XRF 的数据分析通过 XRS-FP2 定量分析软件完成,该软件需针对本 XRF 仪器完成专属配置与校准,才能保障分析结果可靠,具体过程如下。

配置环节主要完成软件与仪器硬件的适配,录入探测器、X 射线管等核心组件参数及仪器几何参数,明确测量环境;根据分析用途选择对应运行模式,配置光谱处理参数,并完成数据传输及存储路径设置,

确保软件与仪器协同工作。

校准分为能量校准与定量校准：能量校准使用配套标样，修正通道与能量的对应关系，也可导入配套软件的校准参数；定量校准可选择无标样(基于内置数据库理论计算)或标样校准(拟合标样峰强度与浓度生成校准系数)，校准后需用标样验证精度，偏差需重新调整。

图 4 是 XRS-FP2 的光谱显示界面，以直方图呈现光谱数据(如 2048 个通道，每个通道对应特定能量范围)，主要展示组 0 的感兴趣光谱(实色图)，最多可叠加 6 个比较光谱(线条图)，同时可显示 KLM 标记，辅助识别元素特征峰[10]。

用户可通过在图表区域单击并向右下拖动光标绘制“橡皮带”，放大特定光谱区域；反向拖动可缩小并恢复完整光谱。该功能便于元素特征比对、定量分析及谱峰识别，助力用户在相关科研领域得出准确结论。

## 4. 测试结果

### 4.1. XRD 测试结果

本实验中，我们采用  $0.2\text{ mm} \times 1.0\text{ mm}$  的发散狭缝，有效保障了光束质量，为 X 射线衍射(XRD)测试的高分辨率、高信噪比奠定基础，同时也为后续物相识别的准确性提供了前提条件。实验采用 9 W 功率进行连续曝光，曝光时长设定为 1200 秒，通过延长曝光时间充分增强样品衍射信号，减少干扰噪声，确保获得清晰、准确的衍射图谱，为物相识别提供可靠的图谱支撑。

进行了石英、二氧化铈和模拟月壤的测试，图 5 是三种测试的衍射光环及图谱，图 6 是对其进行物相分析。测试样品选取石英和  $\text{CeO}_2$  (转动状态下的衍射图案)，两类材料均为 XRD 测试中常用的标准参考样品，其已知晶相信息明确，可作为物相识别的基准参照。其中，石英用于判断测试体系中样品结构的完整性与稳定性， $\text{CeO}_2$  用于评估测试方法对材料晶体结构特性的识别精度，通过与两类标样的衍射图谱进行比对校准，有效提升了后续物相识别的准确性，为实验结果的可靠性提供了重要保障。

值得注意的是，IGG (模拟月壤)样品经研磨处理后进行测试，旨在验证实验方法对复杂样品的物相识别能力，同时通过研磨优化样品结晶状态，使 XRD 测试中能够获得更为清晰的衍射光环图案和特征衍射峰值，助力精准识别样品中的各类物相。

实验结果显示，IGG (模拟月壤)样品的衍射光环呈现出较为完整的特征，表明其晶体结构有序性良好；同时，衍射图谱中的特征衍射峰清晰度高、准确性强，各衍射峰的位移、强度均与预期完全吻合，基于这些特征峰可精准完成物相识别，明确样品中所含晶相的种类及含量，物相识别结果准确可靠。

综上，本实验所采用的实验条件、测量方法不仅能有效保留样品的结构信息，更能实现精准的物相识别，实验结果为后续的材料分析、物相表征及其实际应用提供了可靠的理论与实验依据。

### 4.2. NIST 610 标样 XRF 测试结果

在本次 X 射线荧光(XRF)测试中，我们选用了国家标准实验室 NIST 610 标准样品进行 9 W 功率、600 秒采集时间的测试。图 7 是 Co 靶 NIST 610 标样 XRF 测试结果，经过深入的测试和数据分析，我们发现，在相同功率(9 W, 30 kV, 0.3 mA)和相同采集时间(600 秒)的条件下，对于轻元素的分析，使用钴(Co)靶的荧光峰强度明显更高。这一发现突显了钴靶的有效性，特别是在检测低原子序数的元素(轻元素)时，其发射出的特征 X 射线能显著提高荧光信号的强度。值得注意的是，月球岩石土壤的主要造岩矿物成分包括铝(Al)、硅(Si)、钙(Ca)、镁(Mg)、氧(O)、铁(Fe)、钾(K)和钠(Na)等元素。这些元素的丰富存在为我们提供了研究月球地质组成的重要信息[11]。在 XRF 测试中，能够通过高强度的荧光峰清晰地识别和定量这些元素的相对丰度，从而为进一步的地球科学研究提供强有力的数据支持。

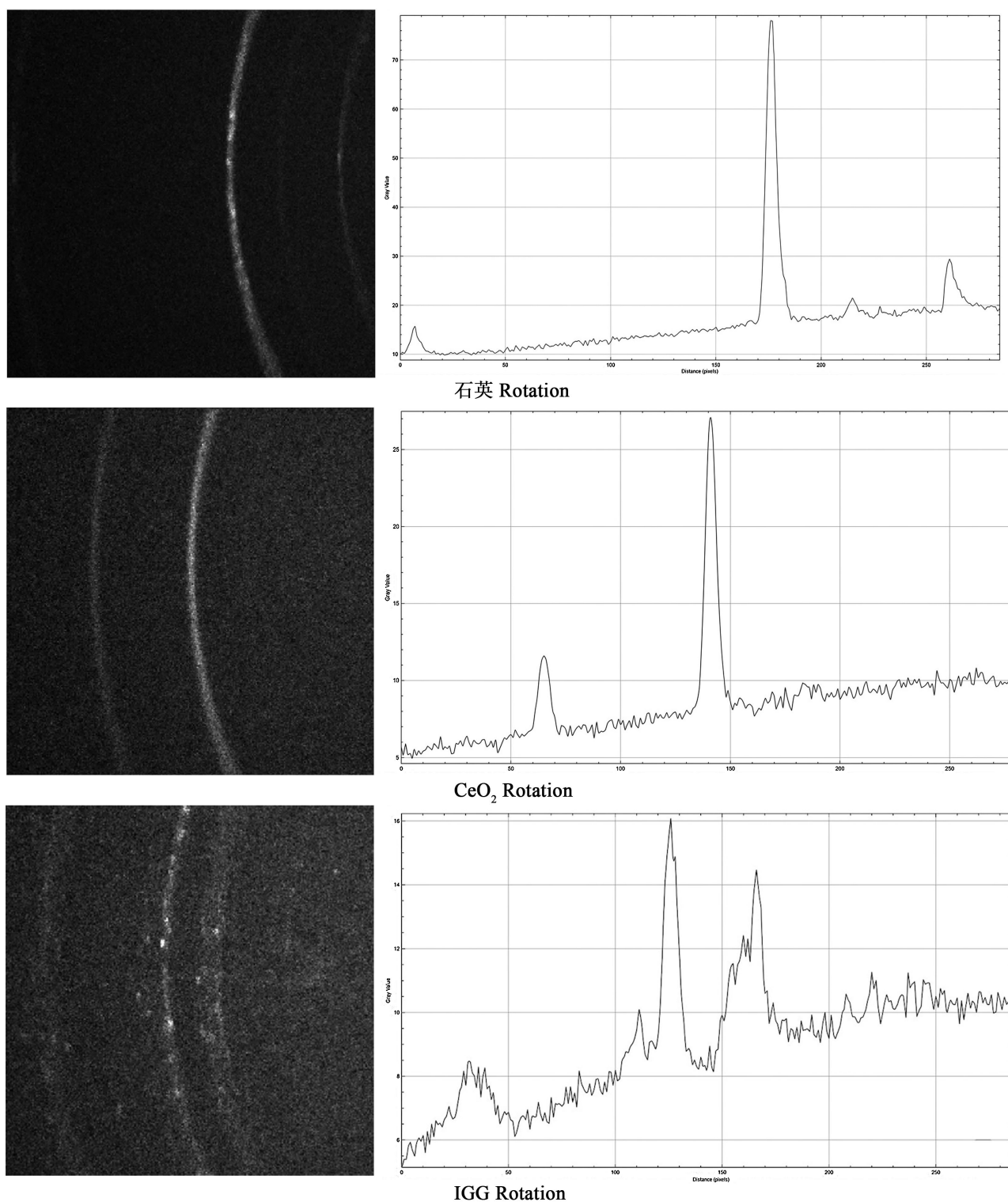
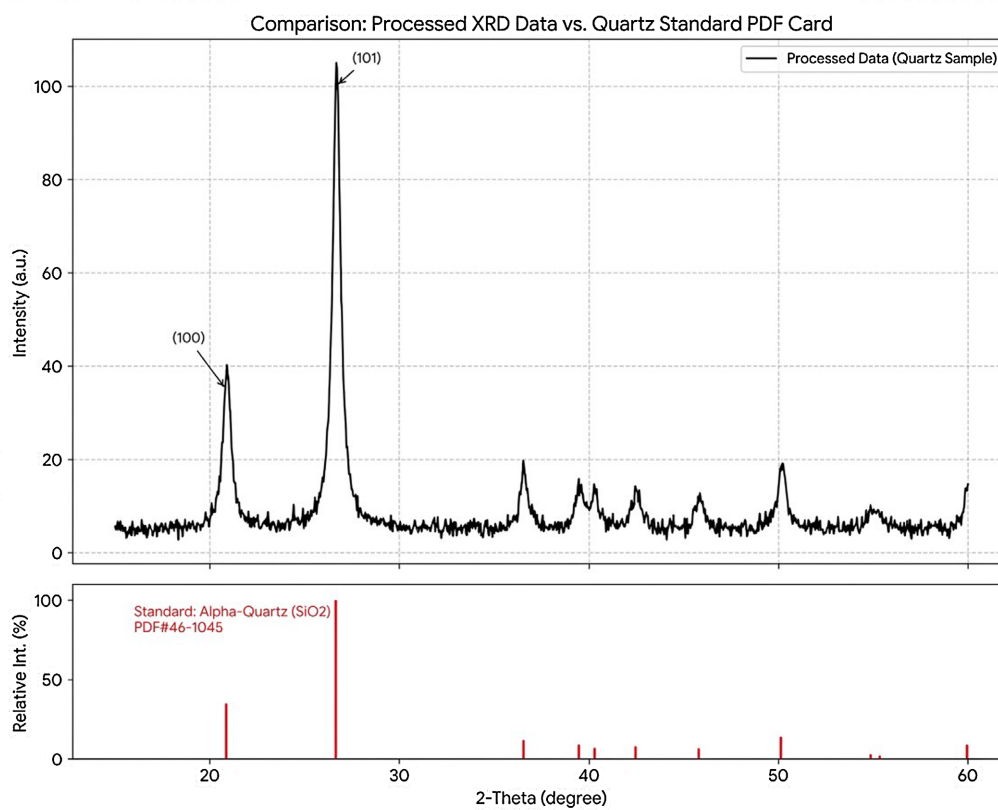
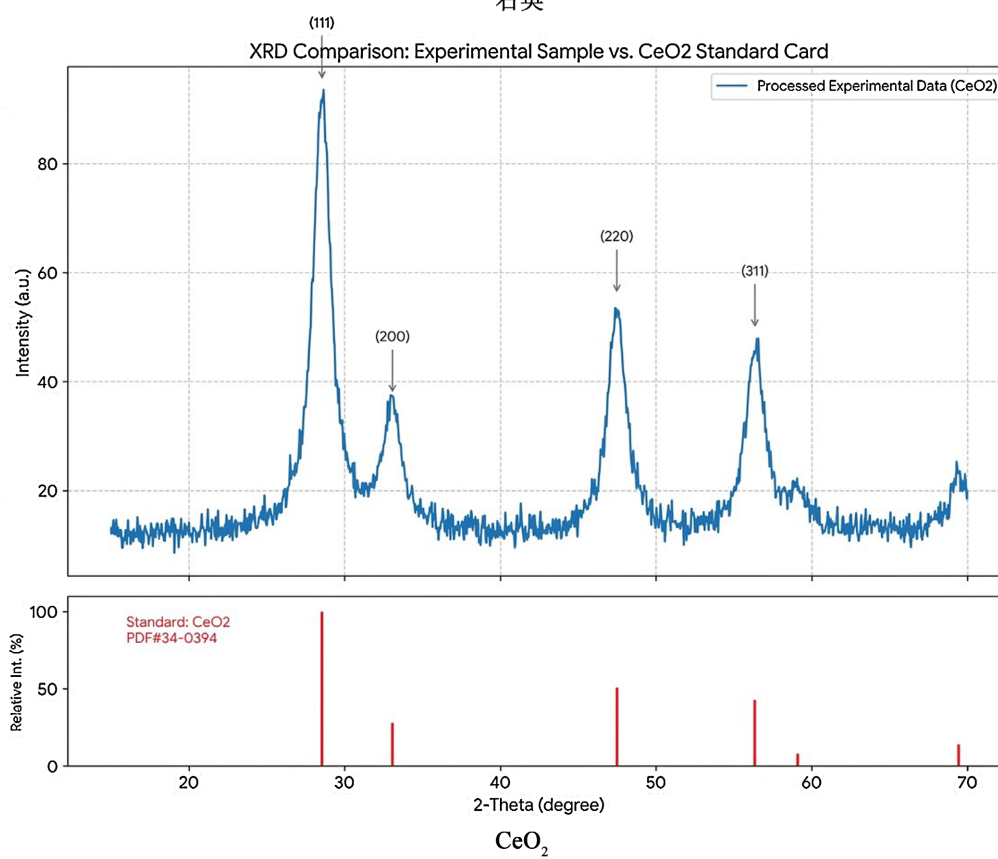


Figure 5. Diffraction rings and diffraction patterns of quartz, CeO<sub>2</sub>, and IGG

图 5. 石英、CeO<sub>2</sub>、IGG 的衍射光环及衍射图谱



石英

CeO<sub>2</sub>

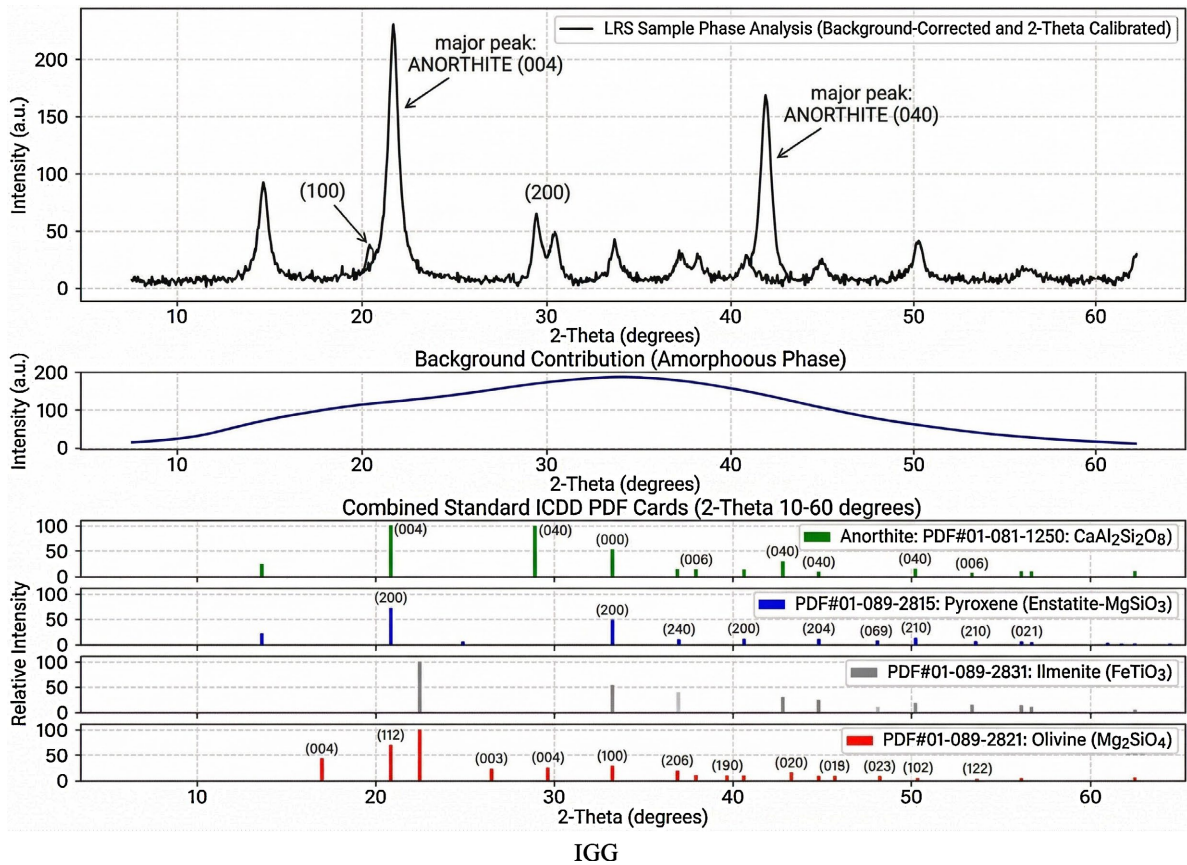


Figure 6. Phase identification of quartz, CeO<sub>2</sub>, and IGG from diffraction patterns  
 图 6. 石英、CeO<sub>2</sub>、IGG 的衍射图谱物相识别

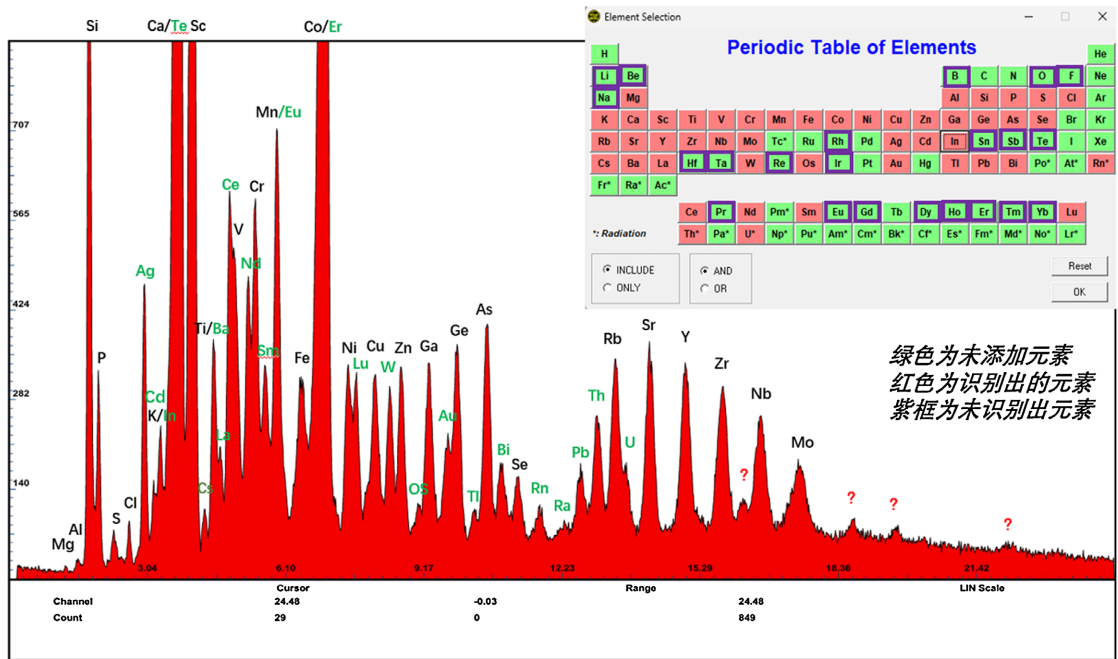


Figure 7. XRF test results of Co target NIST 610 standard sample (9 W, 600 s)  
 图 7. Co 靶 NIST 610 标样 XRF 测试结果(9 W, 600 S)

通过对这些关键元素的分析, 我们不仅可以更好地理解月球的矿物组成与结构, 还可以推测其地质演变过程及形成环境。同时, 钴靶在照射过程中对轻元素的增强作用, 进一步证明了其在宇宙材料分析领域的广泛适用性和重要性。这项研究为未来的行星探测与材料分析奠定了坚实基础, 具有重要的科学意义与实践应用价值。

## 5. 总结

本研究成功研制了一款低功耗 X 射线衍射及 X 射线荧光(XRD/XRF)原理样机, 通过系统性的实验验证, 充分证明了该样机设计方案的可行性与实用性。样机采用创新的掠入射式光路设计, 在小于 10 W 的超低功耗条件下即可稳定运行, 有效突破了传统行星原位分析设备功耗高、能耗大的技术瓶颈, 为深空探测场景下的材料分析提供了高效、可持续的技术解决方案。

实验中, 以石英、二氧化铈及 IGG (模拟月壤)和 NIST 610 标准样品为测试对象, 实现了 XRD 与 XRF 信号的同步采集。该一体化分析模式将晶体结构表征与元素成分分析相结合, 能够全面获取样品的微观结构与化学组成信息, 显著提升了物相识别、成分定量的准确性与可靠性, 相较于单一技术分析手段具有明显优势。测试结果显示, 样机对复杂模拟月壤样品的晶体结构有序性具有良好的识别能力, 衍射峰的位移、强度及 XRF 元素特征峰均符合预期, 验证了设备在月球矿物及深空天体样品分析中的应用潜力。

与国际同类先进设备 NASA 的 CheMin 及本研究 CE-8 原理样机相比, 本样机在核心性能指标上展现出独特的技术优势: 在重量方面, 本样机现在 15 Kg, 最终目标重量为 3 kg, 远低于 CheMin 的 5 kg, 更适配深空探测对载荷轻量化的严苛要求; 功耗上, 本样机运行功耗低于 10 W, 显著低于 CheMin 的 15 W, 实现了低能耗下的高效分析; 分辨率方面, 本样机 FWHM 为  $0.3\sim 0.34^\circ (2\theta)$ , 与 CheMin 的  $0.35^\circ (2\theta)$  及 CE-8 原理样机的  $0.3^\circ\sim 0.34^\circ (2\theta)$  处于同一水平, 保证了晶体结构分析的精度; 分析能力上, 本样机实现了 XRD 与 XRF 的同步集成分析, 而 CheMin 仅具备 XRD 分析功能, CE-8 原理样机虽集成双技术, 但本样机凭借更低的功耗和更紧凑的设计, 在综合性能与应用适配性上更具优势。

该样机的成功研发, 不仅为月球及其他天体的地质矿物分析提供了新型高效的技术工具, 也为行星科学原位探测设备的轻量化、低功耗化发展提供了重要的技术支撑。其创新的光路设计与一体化分析模式, 填补了低功耗深空原位材料分析设备的技术空白, 为未来月球探测、火星探测等深空探测任务中的矿物组成与地质特征研究奠定了坚实基础, 具有重要的科学价值与广阔的工程应用前景。

## 参考文献

- [1] 许乃岑, 沈加林, 张静. X 射线衍射-X 射线荧光光谱-电子探针等分析测试技术在玄武岩矿物鉴定中的应用[J]. 岩矿测试, 2015, 34(1): 75-81.
- [2] Li, J. and Sun, J. (2017) Application of X-Ray Diffraction and Electron Crystallography for Solving Complex Structure Problems. *Accounts of Chemical Research*, **50**, 2737-2745. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.7b00366>
- [3] 陈晨曦. 小型掠入射式近边 X 射线吸收谱仪研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 中国科学院大学, 2016.
- [4] Förster, A., Brandstetter, S. and Schulze-Briese, C. (2019) Transforming X-Ray Detection with Hybrid Photon Counting Detectors. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **377**, Article 20180241. <https://doi.org/10.1098/rsta.2018.0241>
- [5] Papike, J., Taylor, L. and Simon, S. (1991) Lunar Minerals. In: *Lunar Sourcebook: A User's Guide to the Moon*, Cambridge University Press, 121-181.
- [6] Yang, J., Yang, Q., Hu, S., Zhu, X. and Zhai, J. (2022) Analysis and Evaluation of Liquid Metal Anode Target Material of Transmission X-Ray Tube. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, **514**, 8-14. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2022.01.004>
- [7] Suzuki, M., Yamamoto, M., Kumasaka, T., Sato, K., Toyokawa, H., Ariès, I.F., et al. (1999) A Multiple-CCD X-Ray

- Detector and Its Basic Characterization. *Journal of Synchrotron Radiation*, **6**, 6-18.  
<https://doi.org/10.1107/s0909049598014241>
- [8] Heiken, G. (1975) Petrology of Lunar Soils. *Reviews of Geophysics*, **13**, 567-587.  
<https://doi.org/10.1029/rg013i004p00567>
- [9] 张诗吟. X-Ray 粉末衍射定量分析程序的研制与测试[D]: [硕士学位论文]. 北京: 北京工业大学, 2020.
- [10] He, B.B. (2003) Introduction to Two-Dimensional X-Ray Diffraction. *Powder Diffraction*, **18**, 71-85.  
<https://doi.org/10.1154/1.1577355>
- [11] 车浪, 王彬, 赵鹏飞, 等. 月壤原位利用技术研究进展[J]. 工程科学学报, 2021, 43(11): 1433-1446.