



中子散射在化学测量学中的应用

韩泽华^{1,2}, 左太森^{1,2*}, 马长利^{1,2}, 李雨晴^{1,2,3}, 程贺^{1,2*}

1. 中国科学院高能物理研究所, 中国散裂中子源, 东莞 523800

2. 散裂中子源科学中心, 东莞 523800

3. 中国科学院大学, 北京 100049

*通讯作者, E-mail: zuots@ihep.ac.cn; chenghe@ihep.ac.cn

收稿日期: 2023-06-30; 接受日期: 2023-08-09; 网络版发表日期: 2023-11-07

国家自然科学基金(编号: 22273046)和博士后面上基金(编号: DG22114A2L)资助项目

摘要 中子的特性使其能在化学测量学中发挥独特的作用: 中子直接作用于原子核, 穿透性强, 这使复杂样品环境下的原位测量成为可能; 对轻元素和同位素敏感, 可以选择性观察物质内部的复杂结构; 波长和能量与原子间距离和特征弛豫时间相符, 从而可以覆盖多尺度的时空探测范围. 中子散射方法自诞生之日起, 在化学领域的研究中就起着重要作用. 然而, 由于缺乏大型中子源设施, 我国在中子散射领域发展较慢. 随着中国散裂中子源(China Spallation Neutron Source, CSNS)于2018年验收, 并面向全世界用户开放, 越来越多的中子散射用户开始了解中子散射方法. 本文将分别按照测量的特征空间尺寸从小到大, 介绍弹性中子散射方法的中子衍射、中子反射和小角中子散射; 按照动力学特征时间从快到慢, 介绍准弹性中子散射方法的中子背散射与中子自旋回波, 在配位化学、高分子化学、物理化学、电化学及生物化学等领域中的应用, 从而进一步推广中子散射方法, 为我国化学领域的发展服务.

关键词 弹性中子散射, 准弹性中子散射, 化学测量学

1 引言

1931年英国物理学家J. Chadwick发现了中子, 由此打开了中子科学发展的的大门. 然而, 实验室中的小型装置产生的中子通量往往很小, 无法满足散射实验的需求, 因此必须建造大型科学装置来提供足够的中子通量^[1]. 20世纪40年代, 美国物理学家E. Fermi主持建造了世界上第一台可控的原子核反应堆, 反应堆作为中子源可提供足够的中子通量, 这使利用中子散射进行物质结构与动力学的研究成为可能; 1946与1950年,

美国物理学家C.G. Shull与加拿大物理学家B.N. Brockhouse分别开展了弹性与非弹性中子散射的研究, 奠基了中子谱仪方法学^[2]. 从20世纪70年代开始, 随着法国劳厄-朗之万研究所(Institute Laue-Langevin, ILL)^[3]、美国国家标准与技术研究院中子散射研究中心(Nation Institute of Standard and Technology Center for Neutron Research, NCNR)^[4]等反应堆中子源以及英国散裂中子源(ISIS Neutron and Muon Source, ISIS)^[5]、日本散裂中子源(Japan Proton Accelerator Research Complex, J-Parc)^[6]、美国散裂中子源(Spallation

引用格式: Zehua H, Taisen Z, Changli M, Yuqing L, He C. Applications of neutron scattering in chemical measurement science. *Sci Sin Chim*, 2023, 53: 2208–2219, doi: 10.1360/SSC-2023-0121

Neutron Source, SNS)^[7]等散裂中子源的建成, 中子散射实验方法在国外得到了长足的发展. 作为运行中的世界上第四座强脉冲中子源, 中国散裂中子源(China Spallation Neutron Source, CSNS)于2018年建成^[8], 迄今为止已完成8轮开放运行, 注册用户超4800人, 完成课题1000余项^[9], 推动了中子散射在我国的发展. 由于散裂源使用的是非连续的脉冲中子束, 在实验中可以使用某个波长范围内的全部中子, 因此具有三个明显的优势: 有效提高了样品处单位时间、单位面积的中子通量(flux), 节约了测量时间; 通过中子飞行时间(time of flight, tof)为每个散射中子的事件(event)打上时间戳, 有利于动力学过程的追踪; 提高了在一个实验中能够覆盖的尺度范围.

中子作为一种结构探针具有独特的优势^[10]: 中子不带电, 直接与原子核作用, 因此穿透性很强, 使复杂样品环境下的原位测量成为可能; 中子没有热效应, 与物质发生作用时不会对物质造成损伤, 可以进行长时间的原位测量; 中子对轻元素如氢、锂等十分敏感, 在某些需要特别标定轻元素位置的研究中, 具有无可取代的作用; 同位素对中子的散射能力不同, 最典型的如氢($b_H = -3.7406$ fm)、氘($b_D = 6.671$ fm)对中子的散射长度有很大区别(散射长度代表原子对中子的散射能力强弱, 一般使用符号 b 表示), 可以使用衬度匹配技术来研究复杂体系; 中子具有磁矩, 可以用来表征磁结构.

此外, 中子散射方法能够覆盖宽广的时空尺度. 如图1所示. 在空间上, 中子衍射(neutron diffraction)、中子反射(neutron reflection)、小角中子散射(small angle neutron scattering, SANS)与中子成像(neutron imaging)可以覆盖从0.01 Å到0.1 m的特征空间尺寸, 对应从原子位置标定, 到介观多尺度结构, 直至宏观结构信息的测量; 在时间上, 非弹性中子散射(inelastic neutron scattering, INS)与准弹性中子散射(quasi-elastic neutron scattering, QENS)的背散射(neutron backscattering, NBS)和中子自旋回波(neutron spin-echo, NSE)可以覆盖从 10^{-15} 到 10^{-6} s的动力学特征弛豫时间, 对应从原子的振动、转动, 小分子扩散, 到侧基运动, 直至大分子链段平动的多尺度动力学行为测量^[12~16]. 宽广的时空尺度, 可以让用户根据自己的研究对象, 选择一种或多种合适的中子散射方法进行研究.

不同中子散射实验方法的观察对象与测量时空尺

度不同, 概念庞大, 内容繁多. 为了避免言之无物, 以下我们将根据中子散射方法的不同, 介绍几种典型的中子散射实验方法, 包括中子衍射、中子反射、小角中子散射、中子背散射以及中子自旋回波在化学领域前沿研究中的应用, 同时阐述这些研究中使用中子散射方法的必要性与可行性, 以便让读者对不同中子散射方法的特点能够有直观的了解.

2 研究实例

2.1 中子衍射

中子衍射的基本原理和数据分析方法与X射线衍射(X-ray diffraction, XRD)相似, 实验中的衬度差主要来自于原子间周期性的位置关系, 衍射数据中峰位 q 与实空间特征距离 d 的对应关系为 $q = 2\pi/d$ (q 为散射矢量, 由于不同研究人员的习惯, 有时也使用 Q 表示, 本文中二者意义相同), 主要用来标定晶体、准晶中的原子位置. 根据实验需求进行样品环境或谱仪结构的优化, 可以在通用衍射谱仪的基础上进一步衍生出高压衍射、工程材料衍射、高分辨衍射、单晶衍射及全散射谱仪等^[17~21]. 实验中, 科研人员通常利用中子衍射标定轻元素如氢、锂等在样品中的具体位置, 或利用中子的高穿透性进行原位观察, 近期一些典型应用包括: 美国内布拉斯加州医学中心的Azadmanesh等^[22]利用中子衍射的方法测定了人体中锰超氧化物歧化酶(manganese superoxide dismutase)在不同质子化状态下的全原子结构, 并分析了其中质子、电子的协同转移机制; 橡树岭国家实验室的Kneller等^[23]联用中子衍射与X射线衍射分析了SARS-CoV-2病毒中主蛋白酶(M^{pro})与多种抑制剂结合后的晶体结构, 分析了其作为药物靶点的结构特性; 劳伦斯伯克利国家实验室的Huang等^[24]利用中子衍射结合X射线衍射的方法观察了富锂阴极(Li-rich cathode)中过渡金属离子的迁移行为, 研究了其发生电压滞后现象的原因; 北京科技大学的Wang等^[25]联用中子衍射与多种表征手段研究了 Li_2MnO_3 晶体结构与阴离子氧化还原能力间的关系等. 本节将以北卡罗来纳州大的M. Pauly等对碳氮化物(carbon nitride)结构的研究为例进行详细说明.

聚(三嗪酰亚胺) (poly(triazine imide), PTI)与LiCl的复合物PTI/LiCl是一种典型的碳氮化物材料, 具有很好的光电催化性能, 在水解产氢、有机染料降解及

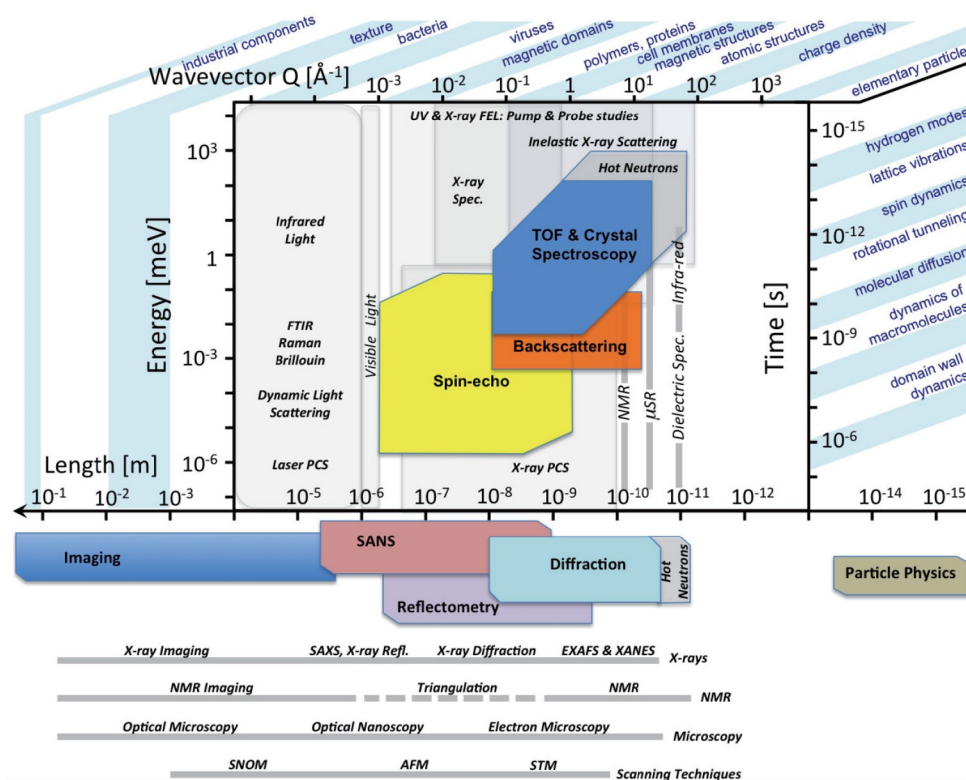


图1 不同中子散射方法对应的时间、空间尺度及常见的适用体系^[11] (网络版彩图)

Figure 1 The time and length scale for different neutron scattering methods and the corresponding general application systems ^[11] (color online).

太阳能电池研发等领域的应用中充满了潜力^[26~30]。良好的性能取决于独特的结构, XRD与理论计算的结果表明, PTI/LiCl具有多层结构, 在层间与层内存在众多尺寸不一的微孔, 每个层内微孔中可能存在两个Li离子从而形成独特的晶体结构, 独特的结构赋予了PTI/LiCl独特的光电特性^[31~33]。然而, 由于Li原子序数小, 对X射线衬度不足, 仅通过XRD无法进一步确定其在微孔中的具体位置。

Pauly等^[34]通过中子衍射实验确定了Li、H在PTI/LiCl微孔中的位置。PTI中有两种不同类型的N原子(分别为酰亚胺-N (N-imide)和三嗪-N (N-triazine)), 二者均可与质子结合; 质子与Li离子的相对位置关系又会影晌体系整体的势能, 综合考虑Li离子与质子在PTI框架中的位置, 结合最小对称性原则得到PTI/LiCl有18种可能结构(图2a和图2b为其中两种)。通过进一步的势能计算, Pauly等认为, Li离子的结构应该具有 $Ama2$ 的空间群对称性, 同时与质子结合的酰亚胺-N和三嗪-N各占50% (图2b), 此时体系能量最低。为验证这一推测, Pauly等利用氘代的PTI/LiCl提高体系对中子的衬

度, 进行了中子衍射实验, 并将实验结果与图2b中结构对应的理论散射结果进行了对比。如图2c所示, 两条曲线十分吻合, 这说明通过理论预测得到的结构很可能是PTI/LiCl的真实结构。该研究解决了一直以来的PTI/LiCl结构测定问题, 为未来碳氮化物材料的进一步研发打下了基础。

2.2 中子反射

中子反射的一般探测尺度为1~100 nm, 实验中的衬度差主要来自膜与膜间衬度的不同或膜内衬度的改变, 中子反射实验更加关注同一散射峰左右两个峰谷间的差值 Δq , 其与膜厚度有关系 $d = 2\pi/\Delta q$, 可用于软物质、电池等界面体系在深度方向上的结构测量, 或者特征弛豫时间在分钟以上量级的扩散动力学研究。中子反射要求样品界面处有平方厘米量级范围的平整区域, 且在界面间有明显的中子衬度差。近期一些典型应用包括: 橡树岭国家实验室的Kumar等^[35]联用中子反射与多种研究手段, 分析了咪唑基聚合离子液体(PolyIL)中聚合物分子量对电极-聚合物界面结构与性

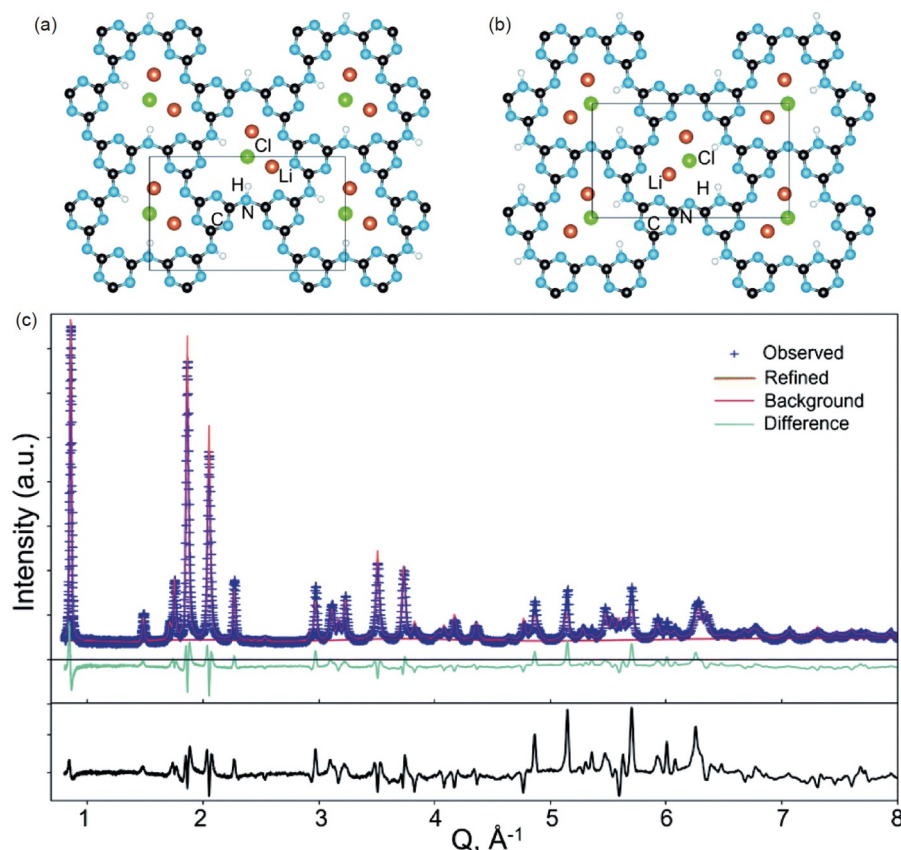


图 2 Li离子具有 $Ama2$ 空间群对称性时, 质子(a)均与酰亚胺-N及(b)一半与酰亚胺-N、一半与三嗪-N相结合时PTI/LiCl的晶体结构模型示意图. C, 黑色; N, 蓝色; Li, 橙黄; Cl, 绿色; H, 白色. (c) 中子衍射实验结果、由(b)图结构得到的理论散射曲线及二者差值^[34] (网络版彩图)

Figure 2 Crystalline structures of ordered PTI/LiCl model while protons are (a) only on N-imide and (b) on half N-imide and half N-triazine in $Ama2$ space group of Li. Atoms are labelled as C black, N blue, Li orange, Cl green, and H white. (c) Results and difference of neutron diffraction data and the structure of (b) ^[34] (color online).

能的影响; 南密西西比大学的Galuska等^[36]利用中子反射研究了在水基底上制备的厚度小于100 nm的聚苯乙烯(polystyrene, PS)薄膜的界面结构; 斯坦福大学的Blair等^[37]利用原位中子反射研究了电极界面Li离子行为与氮气分子还原反应间的关系; 橡树岭国家实验室的Browning等^[38]联用中子反射与原位电化学测试, 对Li-LiPON固体界面的多层膜结构进行了测量等. 本节以德州农工大学的Aliakseyeu等对星型高分子(star polymer)结构与其制备的薄膜中高分子层间迁移行为的关系研究为例, 进行详细说明.

Aliakseyeu等制备了分子量和分子量分布类似的线型(linear, L-)、4臂(4arm, 4-)、6臂(6arm, 6-)与8臂(8arm, 8-)星型(star)聚丙烯酸(poly(acrylic acids), PAA)^[39], 并将其与氢化(hydrogenated, h-)和氘代(deuter-

ated, d-)的聚甲基丙烯酸2-(二甲基氨基)乙酯(poly[2-(dimethylamino)ethyl methacrylate], PDMAEMA)结合, 制备得到PAA/h-PDMAEMA/PAA/d-PDMAEMA的layer-by-layer多层膜^[40], 以此为样品研究了高分子在膜间迁移行为与PAA结构的关系, 本文着重介绍其对PDMAEMA在层间(inter-diffusion)迁移行为的研究^[41-45].

图3a, b展示了LPAA/PDMAEMA与8PAA/PDMAEMA薄膜在干燥状态下与加入NaCl溶液30 min后的中子反射结果^[46]. 如图3c, d所示, 通过模型拟合可以得到两种样品中散射长度密度(scattering length density, SLD)沿垂直基底方向的分布: 随着PDMAEMA的扩散, h-PDMAEMA与d-PDMAEMA在层间发生迁移, 导致SLD在层间的分布随时间改变; 通过SLD的分布情况可进一步得到初始d-PDMAEMA层中d-PDMAE-

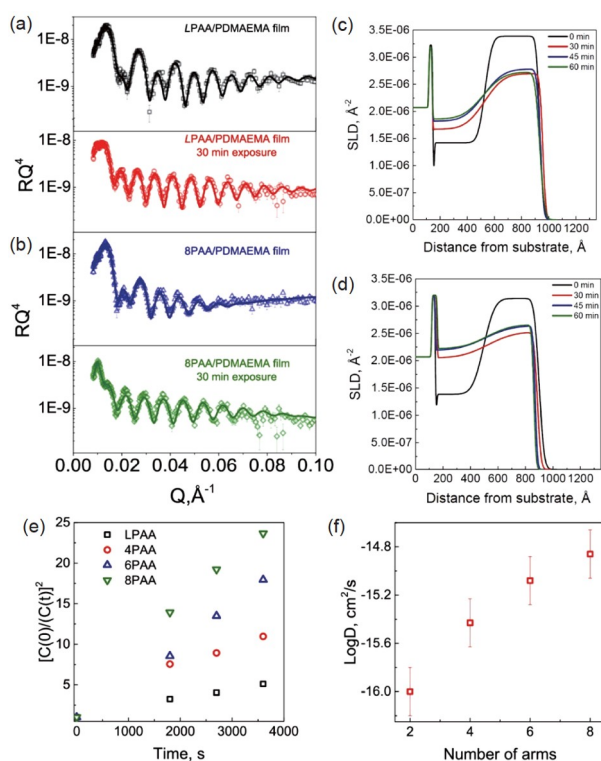


图 3 (a, c) LPAA/PDMAEMA与(b, d) 8PAA/PDMAEMA在加入NaCl溶液前后的中子反射实验结果与SLD沿垂直薄膜方向分布的拟合结果; (e) LPAA/PDMAEMA (方形)、4PAA/PDMAEMA (圆形)、6PAA/PDMAEMA (正三角)与8PAA/PDMAEMA (倒三角)中 $C(0)/C(t)$ 函数结果; (f) 线型与星型PAA与PDMAEMA构建的layer-by-layer薄膜中PDMAEMA的扩散系数 D 的计算结果^[46] (网络版彩图)

Figure 3 Neutron reflectivity data and the corresponding fitted SLD profile for (a, c) LPAA/PDMAEMA and (b, d) 8PAA/PDMAEMA dry films before and after exposure to NaCl solution. (e) $C(0)/C(t)$ function for LPAA/PDMAEMA (square), 4PAA/PDMAEMA (circle), 6PAA/PDMAEMA (up triangle), and 8PAA/PDMAEMA (down triangle). (f) Diffusion coefficients of PDMAEMA within LBL films containing linear and star PAA ^[46] (color online).

MA在不同时刻的浓度 $C(t)$, 其与初始浓度 $C(0)$ 有关系^[47-51].

$$\left(\frac{C(0)}{C(t)}\right)^2 = \frac{2D}{\sigma_0^2}t + 1 \quad (1)$$

其中, D 为扩散系数, σ_0 为预先得到的与表面粗糙度有关的参数^[52]. 图3e为不同类型PAA/PDMAEMA薄膜中的 $C(0)/C(t)$ 结果, 图3f为扩散系数 D 与枝接臂数目间的关系. 由图可知, 在酸性环境且分子量一定的情况下, 星型PAA的枝接臂越多, PDMAEMA的扩散就越快. 这回答了星型高分子结构对其构建的多层膜中高分子迁移行为的影响, 为将来构建功能性多层膜提供了指导.

2.3 小角中子散射

与小角激光散射(small angle light scattering, SLS)和小角X射线散射(small angle X-ray scattering, SAXS)原理和分析方法类似, 小角中子散射(small angle neutron scattering, SANS)一般用来表征1.0~300 nm范围内样品内部的特征结构. SANS由于探测的散射角度较小、测量尺寸较大, 一般只能给出粗粒化模型的信息. 散射曲线中一般没有明显的散射峰; 衬度差来自于散射体占据的单位空间(如单体)与所处背景环境(如其他单体或者溶剂分子)间散射长度密度的区别. 随着中子散射技术的发展, SANS向更低与更高 q 两个方向发展: 以牺牲样品处入射中子通量为代价, 向更低 q 发展出可测量1 μm 以内特征尺寸的微小角(very small angle neutron scattering, VSANS), 与30 μm 以内特征尺寸的超小角(ultra-small angle neutron scattering, USANS)谱仪及实验技术^[53], 以牺牲大尺度测量能力为代价, 向更高 q 发展, 通过与衍射结合, 发展出针对无序材料的大分子全散射谱仪及实验技术, 其一般的探测范围为0.02~50 $\text{\AA}^{-1}$, 结合计算机模拟等手段, 可以复现散射体的三维全原子结构^[54-57].

对于大部分研究溶液体系的用户而言, 只需要使用氘代溶剂就可以满足SANS实验的衬度差需求; 对更加资深的用户, 则可以利用SANS的高穿透性和选择观察性来设计实验. 以CSNS的14号束线VSANS谱仪为例, 其样品室预留了1.8 m (沿束线方向) $\times$ 2.3 m (水平垂直束线方向) $\times$ 6.0 m (高度)的空间以便用户可以根据需求设计样品环境; 同时也以可利用氢、氘的相干散射长度不同, 使用衬度匹配技术来选择性观察复杂体系中的特定结构. 近期一些典型应用包括: 橡树岭国家实验室的Lam等^[58]通过小角中子散射, 研究了由十六烷基三甲基溴化铵(hexadecyltrimethylammonium bromide, CTAB)和水杨酸钠(sodium salicylate, NaSal)形成的蠕虫状胶束(worm micelle)的结构与其所处的离子环境间的关系; 加利福尼亚大学的Danielson等^[59]利用小角中子散射结合理论计算, 分析了多种给体-受体共聚物(donor-acceptor conjugated polymers)的侧链尺寸与枝化情况对链刚度及电荷载流子迁移速率的影响; 卡内基梅隆大学的Zhao等^[60]利用小角中子散射研究了三种不同序列的聚(丙烯酸正丁酯/甲基丙烯酸甲酯) (poly(*n*-butyl acrylate/methyl methacrylate), [P(BA/MMA)])制备得到的锁-键共聚物(lock-and-key

copolymers)的结构与自修复功能间的关系; 麻省理工学院的Beech等^[61]联用小角中子散射与多种实验手段测定了双端基可交联的聚乙二醇(polyethylene glycol, PEG)形成的凝胶网络中, 高分子单链的构象变化情况. 本节以北德克萨斯大学的Wang等对金属有机骨架化合物(metal-organic frameworks, MOFs)中蛋白质结构的研究为例详细说明.

MOF-919是一种典型的金属有机骨架化合物, 其结构中具有三种直径, 分别为1.8、4.9与6.0 nm的连通微孔(图4a), 适于作为功能蛋白的封装材料^[63-67]. Wang等^[62]使用小角中子散射结合计算机模拟的方法, 研究了绿色荧光蛋白(green fluorescent protein, GFP)在不同浓度下嵌入MOF-919后的结构, SANS实验的结果如图4b所示. 通过生物小角数据分析软件ATSAS, 可以从散射曲线重建散射体的对分布函数(pair distribution function, 一般用 $P(r)$ 表示)^[68,69], 结果如图4c, d所示: 通过自由GFP与封装GFP的 $P(r)$ 结果对比可以看出, 封装GFP的均方回转半径(mean square radius of gyration, R_g)明显大于自由GFP; 进一步分析发现, 不同浓度封装GFP的 $P(r)$ 中存在的特征峰, 均能够与MOF-919本身的某个(或某些)特征结构对应, 这说明MOF-919中微孔的存在, 既为GFP的嵌入创造了条件, 同时也对GFP的构象产生了影响. 通过ATSAS可以进一步复现体系的三维空间结构^[70]. 图4e为9.6 mg/mL浓度下嵌入MOF-919的GFP的三维空间结构图, 图中黑色线条勾勒的为MOF-919的空间结构, 半透明蓝色区域为通过ATSAS复现的嵌入MOF-919中GFP所占据区域的三维结构, 实心蓝色区域则是单个GFP的结构. 由图可知, 此时一个MOF-919单体中嵌入了三个GFP, 三个GFP组合起来的形状与MOF-919中的部分联通微孔区域十分吻合. 该研究直观地回答了MOF材料对封装蛋白质结构的影响, 为将来通过设计MOF材料结构实现多样功能提供了理论基础.

2.4 中子背散射与中子自旋回波

准弹性中子散射(quasi-elastic neutron scattering, QENS)的背散射(neutron backscattering, NBS)和中子自旋回波(neutron spin-echo, NSE)可以用来研究体系中的动力学行为, 两者都可以通过实验得到体系中H原子的自相关函数(self-correlation function), 区别在于二者观察的空间与时间尺度不同: NBS一般观察

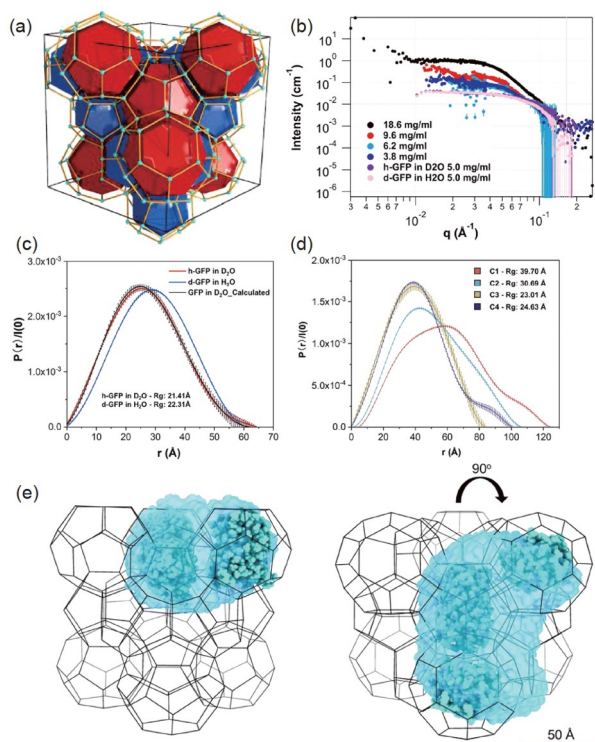


图 4 (a) MOF-919晶胞的三维结构. 1.8 nm微孔, 青色; 4.9 nm微孔, 蓝色; 6.0 nm微孔, 红色. 原子类型: C, 灰色; N, 蓝色; O, 红色; Cu, 绿色; Al, 棕色. (b) 不同浓度下GFP的SANS实验结果. (c) 水中自由GFP与不同浓度GFP嵌入MOF-919中的对分布函数结果, 其中C1、C2、C3、C4分别对应浓度18.6、9.6、6.2与3.8 mg/mL. (d) $P(r)$ for GFP with different concentrations in MOF-919. C1: 18.6 mg/mL, C2: 9.6 mg/mL, C3: 6.2 mg/mL, C4: 3.8 mg/mL. (e) 3D reconstruction of C2 GFP in MOF-919^[62] (网络版彩图)

Figure 4 (a) The structure of MOF-919 unit cell. 1.8 nm micropore, cyan; 4.9 nm micropore, blue; 6.0 nm micropore, red. The atom type: C grey, N blue, O red, Cu green, Al brown. (b) The SANS profile for GFP in MOF-919 with different concentrations. (c) $P(r)$ for GFP in water and (d) $P(r)$ for GFP with different concentrations in MOF-919. C1: 18.6 mg/mL, C2: 9.6 mg/mL, C3: 6.2 mg/mL, C4: 3.8 mg/mL. (e) 3D reconstruction of C2 GFP in MOF-919^[62] (color online).

$0.2\sim 3\text{ \AA}^{-1}$ 尺度上 $10^{-3}\sim 1\text{ ns}$ 量级的运动; 而NSE一般观察 $0.01\sim 0.1\text{ \AA}^{-1}$ 尺度上 $0.01\sim 100\text{ ns}$ 量级的运动^[71]. NBS和NSE通常用来研究富H侧基或聚合物链段的动力学. 二者虽然观察窗口不同, 但是数据分析方法基本一致, 比较类似动态激光散射(dynamic light scattering, DLS)的相关函数分析方法. 以下分别介绍二者的典型应用.

2.4.1 中子背散射

NBS适合观察原子、离子的迁移行为. 假设样品在(接近)绝对零度(一般为4 K)时的散射完全是弹性散射, 以此时的散射曲线随能量的分布($I(q)$ vs. E)为散射

背景, 然后测量不同温度下准弹性散射的能量展宽, 通过退卷积与傅里叶变换的数据处理方式, 可以得到目标条件下特征尺寸 $d = 2\pi/q$ 上富氢原子位置的自相关函数随时间的变化结果, 进而分析富氢原子所在位置的动力学行为。近期一些典型应用包括: 乔治亚理工学院的Moon等^[72]联用NBS与多种研究手段研究了聚乙烯亚胺(poly(ethyleneimine), PEI)与多孔二氧化硅SBA-15的相互作用对其结构、动力学及CO₂吸附过程的影响; 北达科他州立大学的Alesadi等^[73]用NBS结合机器学习(machine learning)、分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟等方法建立了一个预测共轭聚合物(conjugated polymers, CPs)玻璃化温度(T_g)的模型, 并成功预测了几种新型高性能聚合物太阳能电池材料的玻璃化温度; 弗吉尼亚理工大学的Elliott等^[74]使用NBS研究了离子液体在多孔碳纤维(porous carbon fibers, PCFs)中的扩散行为; 美国海军科学研究实验室的Laskoski等^[75]联用NBS与多种研究手段, 观察了四(苯乙炔基)苯(tetrakis(phenylethynyl)benzene, TPEB)与低聚邻苯二甲腈树脂(oligomeric phthalonitrile resin, Res)共混的热固化(thermoset)过程中二者的结构变化

和动力学行为等。本节以橡树岭国家实验室的N.C. Osti等对赝电容(pseudocapacitive)体系中溶剂分子动力学行为的研究为例详细说明。

赝电容是近年来提出的一个新概念, 电活性物质在表面或内部进行欠电位沉积, 可发生高度可逆的化学吸附效应, 从而呈现出电容的特性^[76]。在相同电极面积的情况下, 赝电容的电容量可以达到传统双电层电容的10~100倍, 作为一种电极的备用材料具有极大的潜力。

双(三氟甲磺酰基)酰亚胺锂(lithium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide, LiTFSI)在有机溶剂中具有非常明显的赝电容特性^[77]。Osti等^[78]使用多种有机溶剂, 包括乙腈(acetonitrile, ACN)、四氢呋喃(tetrahydrofuran, THF)、甲醇(methanol, MeOH)、二甲基亚砜(dimethyl sulfoxide, DMSO)以及碳酸丙烯酯(propylene carbonate, PC), 分别配制了1 M的LiTFSI溶液, 通过NBS的实验方法, 对比了溶剂分子在混合溶液与溶剂本体中扩散行为的区别。

如图5(a)所示, 作者对比了ACN本体与ACN-LiTFSI混合溶液的NBS结果。由于LiTFSI中没有氢原子, 因

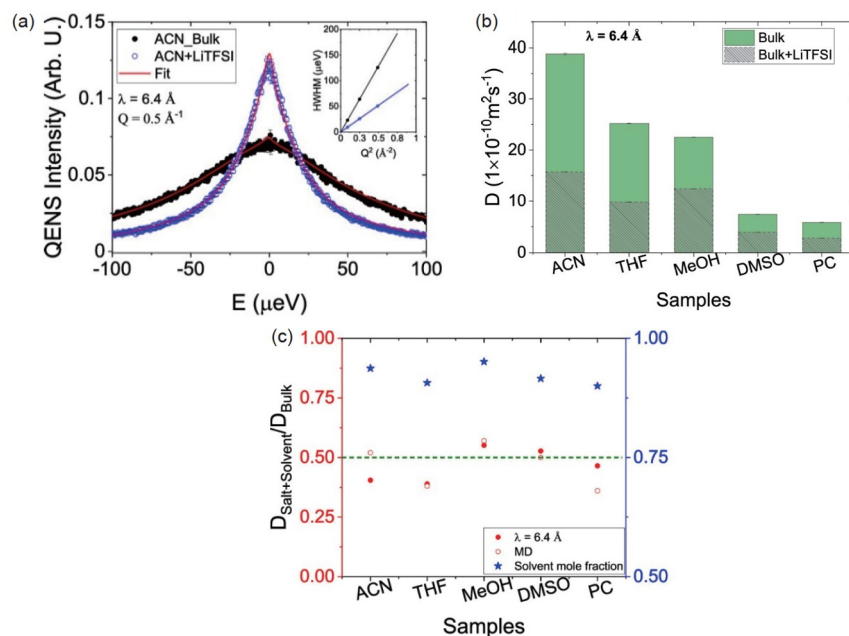


图 5 (a) ACN在本体与1 M的LiTFSI溶液的QENS实验结果及拟合结果对比; (b) 五种有机溶剂中溶剂分子的扩散系数在溶剂本体与1 M LiTFSI溶液中的对比; (c) 五种有机溶剂的溶剂分子在1 M LiTFSI溶液中的扩散系数与溶剂主体中扩散系数的实验结果以及模拟结果的比值(左轴), 以及扩散率的比值与溶剂摩尔分数的关系(右轴)^[78] (网络版彩图)

Figure 5 (a) QENS spectra and fitting results of bulk and 1 M solution of LiTFSI with acetonitrile. (b) Diffusivities of five different organic solvents in bulk and 1 M solutions of LiTFSI. (c) Ratios of diffusivities (left axis) of solvents in the mixtures to that of bulk solvents calculated from experiments and MD simulations, and the dependence of the diffusivity's ratio on the calculated solvent mole fraction ^[78] (color online).

此实验结果中的QENS信号基本由溶剂分子贡献. 图5a的内插图展示了两种情况下散射峰的半高宽随 q 的变化情况, 通过该结果可以进一步计算得到溶剂分子的扩散系数 D ^[79]. 包括ACN在内的多种小分子在本体与混合溶液中扩散系数 D 的结果如图5b所示, 由图可知: 在加入LiTFSI后, 有机溶剂分子的运动能力下降明显. 将有机溶剂分子在1 M的LiTFSI溶液中的扩散系数与通过实验和计算机模拟得到的溶剂本体中的扩散系数分别作比, 结果如图5c所示. 由图可知: 在加入LiTFSI后, 混合体系中溶剂分子的扩散系数普遍为主体中的约0.5倍, 且具体值与溶剂的摩尔分数有关. 该关系在LiTFSI-有机溶剂的体系中具有一般性^[80,81]. 这一结论为将来基于有机溶剂的赝电容体系开发新的电解质系统提供了基础.

2.4.2 中子自旋回波

相对于NBS来说, NSE更适用于研究运动更慢的链段动力学行为. 与NBS类似, NSE通过测量极化中子(polarized neutron)进动相位在散射过程中的改变, 同样可以得到体系中氢原子在散射矢量 q 上的自相关函数, 进而分析在尺寸 $d = 2\pi/q$ 上的动力学行为. 近期一些典型应用包括: 路易斯安娜州立大学的Gupta等^[82]使用NSE, 并通过建立新的动力学模型, 研究了多种磷脂(phospholipids)在脂质体液相中的多尺度动力学行为; 弗吉尼亚理工大学的Chakraborty等^[83]联用NSE与SANS, 研究了胆固醇对1,2-二醇基-sn-甘油-3-磷酸胆碱(1,2-dioleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine, DOPC)形成的不饱和脂质膜的局部硬化作用; 麻省理工学院的Rao等^[84]联用NSE与瑞利散射(Rayleigh scattering), 研究了蛋白质水凝胶(protein hydrogels)中链段与质心动力学行为间的关系; 橡树岭国家实验室的Goswami等^[85]利用NSE、SANS与计算机模拟, 研究了聚苯乙烯-聚乙二醇嵌段共聚物(poly(styrene-*b*-ethylene oxide), PS-PEO)中PEO在嵌段界面与端基位置动力学行为的区别等. 本节以路易斯安那州立大学K.J. Bichler等对不同形态高分子刷(bottlebrush polymers)扩散行为的研究为例详细说明.

聚二甲基硅氧烷(poly-(dimethylsiloxane), PDMS)是制备高分子刷的常用材料, 具有充足的枝接位点, 并可通过调控主链与支链的尺寸来改变高分子刷的结构^[86]. Bichler等^[71]以PDMS为原料, 在使用主链分子量

(M)为13500 g/mol的PDMS的基础上, 制备了侧链分子量 M^{side} 分别为1800与11500 g/mol的PDMS-*g*-PDMS, 并使用NSE研究了二者在轴向与径向上扩散行为的区别(图6a, b).

图6c, d分别是 $M^{\text{side}} = 1800$ g/mol与 $M^{\text{side}} = 11500$ g/mol的PDMS-*g*-PDMS通过使用多个拉伸指数(stretched exponential)模型, 对由NSE实验数据得到的自相关函数 $S(q, t)/S(q)$ 进行拟合的结果: 对于 $M^{\text{side}} = 1800$ g/mol的样品, 从拟合模型中可以得到两个扩散(diffusion)系数与一个拉伸指数; 对于 $M^{\text{side}} = 11500$ g/mol的样品, 则只有一个扩散系数和一个拉伸指数^[87,88]. 根据模型拟合的结果可以进一步得到二者

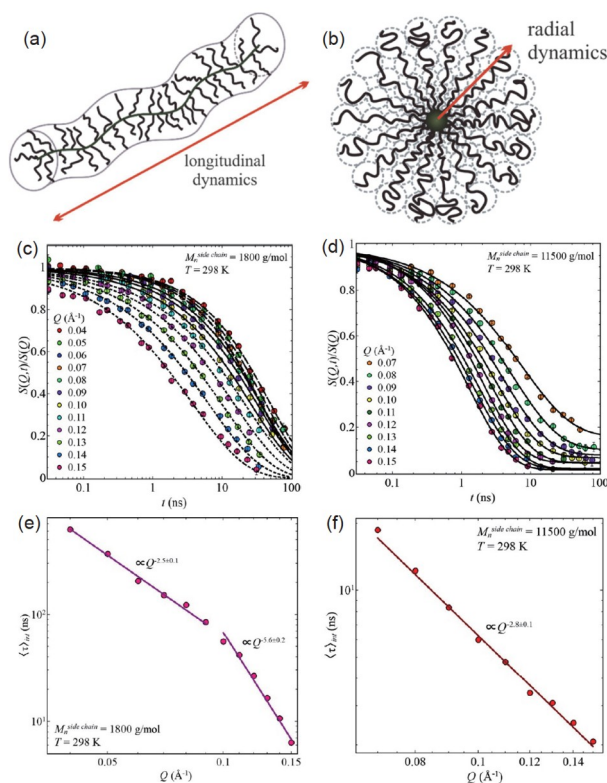


图6 高分子刷在轴向(a)与径向(b)上的动力学行为示意图. (c) $M^{\text{side}} = 1800$ g/mol与(d) $M^{\text{side}} = 11500$ g/mol时PDMS-*g*-PDMS通过NSE实验数据得到的自相关函数 $S(q, t)/S(q)$ 及拟合结果; (e) $M^{\text{side}} = 1800$ g/mol与(f) $M^{\text{side}} = 11500$ g/mol时PDMS-*g*-PDMS中弛豫时间 τ 与散射矢量 q 关系的示意图^[71](网络版彩图)

Figure 6 Illustration of the (a) longitudinal and (b) radial dynamics. The self-correlation function $S(q, t)/S(q)$ of (c) $M^{\text{side}} = 1800$ g/mol and (d) $M^{\text{side}} = 11500$ g/mol from NSE experiment and the fitting results. The relaxation time τ as a function of scattering momentum transfer q for PDMS-*g*-PDMS with (e) $M^{\text{side}} = 1800$ g/mol and (f) $M^{\text{side}} = 11500$ g/mol ^[71] (color online).

扩散行为的弛豫时间 τ 随散射矢量 q 的关系, 如图6e, f所示. 由图6e可知: $M^{\text{side}} = 1800 \text{ g/mol}$ 时, PDMS-g-PDMS在低 q 区域(即大尺度上)的 τ 正比于 $q^{-2.5}$, 该关系体现的是链在轴向上的运动行为, 即链整体的扩散行为与蠕虫状胶束的运动模式(τ 正比于 $q^{-8/3}$)相似; 而高 q 区域(即小尺度上)的 τ 正比于 $q^{-5.6}$, 此时对应的是链在径向上的运动行为, 即侧链运动明显区别于星型高分子枝接链 τ 正比于 q^{-3} 的运动模式, 这说明此时PDMS-g-PDMS在整体运动上体现一种细长柔性物体的特点, 但侧链的运动受本身尺寸与环境的影响体现出复杂的动力学行为^[89,90]. 由图6f可知: $M^{\text{side}} = 11500 \text{ g/mol}$ 时, PDMS-g-PDMS仅存在一种扩散模式, 这说明此时高分子链在轴向与径向上的运动在扩散行为上几乎无区别, 其 τ 正比于 $q^{-2.8}$ 次方, 该结果与球状胶束(sphere mi-

celle)的扩散运动类似(τ 正比于 q^{-3})^[82]. 该研究结论为今后设计功能性高分子刷给出了指导.

3 总结与展望

中子散射是研究物质结构与动力学行为的有力表征手段. 多种类型的中子散射实验方法在化学领域的研究中均发挥着重要的作用. 将不同的中子散射方法相结合, 可以获得独特的样品内部时空结构信息. 通过本文对中子衍射、中子反射、小角中子散射、背散射及中子自旋回波技术应用实例的介绍, 我们希望能够让读者对不同类型的中子散射方法及其适用的研究领域有一个基本的认知, 为CSNS的用户拓展、中子散射应用在国内的发展以及我国化学领域的研究提供助力.

参考文献

- Di Cola E, Grillo I, Ristori S. *Pharmaceutics*, 2016, 8: 10
- Higgins JS, Benoit HC. *Polymers and Neutron Scattering*. Oxford: Clarendon Press, 1994
- ILL Neutrons for Society. <https://www.ill.eu>. Available: 2023.06.27
- NIST Center for Neutron Research, NIST. <https://www.nist.gov/ncnr>. Available: 2023.06.27
- ISIS Neutron and Muon Source. <https://www.isis.stfc.ac.uk/Pages/home.aspx>. Available: 2023.06.27
- <https://j-parc.jp/c/>. Available: 2023.06.27
- Neutron Sciences. Neutron Science at ORNL. <https://sns.gov/>. Available: 2023.06.27
- Chen H, Wang XL. *Nat Mater*, 2016, 15: 689–691
- 中国散裂中子源. <http://csns.ihep.ac.cn>. Available: 2023.06.27
- Hashimoto T. Scattering mechanism of X-ray, light and neutron scattering. In: Hashimoto T, Ed. *Principles and Applications of X-ray, Light and Neutron Scattering*. Singapore: Springer Nature Singapore, 2022
- Science Using Neutrons, ESS. <https://europeanspallationsource.se/science-using-neutrons>. Available: 2023.06.27
- Haberl B, Guthrie M, Boehler R. *Sci Rep*, 2023, 13: 4741
- Guasco L, Khaydukov YN, Pütter S, Silvi L, Paulin MA, Keller T, Keimer B. *Nat Commun*, 2022, 13: 1486
- Liu D, Song K, Chen W, Chen J, Sun G, Li L. *Nucl Anal*, 2022, 1: 100011
- Zhao K, Zhang P, Xue S, Han S, Müller HS, Xiao Y, Hu Y, Hao L, Mei L, Li Q. *Mater Charact*, 2021, 172: 110890
- Gardner JS, Ehlers G, Faraone A, García Sakai V. *Nat Rev Phys*, 2020, 2: 103–116
- Bull CL, Funnell NP, Tucker MG, Hull S, Francis DJ, Marshall WG. *High Pressure Res*, 2016, 36: 493–511
- Gao J, Zhang SY, Zhou L, Ma Y, Hu C, Zhan X, Du W, Wang C, Gong Z, Song W, Ding C, Qiu J. *Nucl Instrum Methods Phys Res Sect A*, 2022, 1034: 166817
- Hoelzel M, Senyshyn A, Juenke N, Boysen H, Schmahl W, Fuess H. *Nucl Instrum Methods Phys Res Sect A*, 2012, 667: 32–37
- Yano N, Yamada T, Hosoya T, Ohhara T, Tanaka I, Kusaka K. *Sci Rep*, 2016, 6: 36628
- Xu J, Xia Y, Li Z, Chen H, Wang X, Sun Z, Yin W. *Nucl Instrum Methods Phys Res Sect A*, 2021, 1013: 165642
- Azadmanesh J, Lutz WE, Coates L, Weiss KL, Borgstahl GEO. *Nat Commun*, 2021, 12: 2079
- Kneller DW, Li H, Phillips G, Weiss KL, Zhang Q, Arnould MA, Jonsson CB, Surendranathan S, Parvathareddy J, Blakeley MP, Coates L, Louis JM, Bonnesen PV, Kovalevsky A. *Nat Commun*, 2022, 13: 2268
- Huang J, Ouyang B, Zhang Y, Yin L, Kwon DH, Cai Z, Lun Z, Zeng G, Balasubramanian M, Ceder G. *Nat Mater*, 2023, 22: 353–361

- 25 Wang B, Zhuo Z, Li H, Liu S, Zhao S, Zhang X, Liu J, Xiao D, Yang W, Yu H. *Adv Mater*, 2023, 35: 2207904
- 26 Schwinghammer K, Mesch MB, Duppel V, Ziegler C, Senker J, Lotsch BV. *J Am Chem Soc*, 2014, 136: 1730–1733
- 27 Ham Y, Maeda K, Cha D, Takanabe K, Domen K. *Chem Asian J*, 2013, 8: 218–224
- 28 Heymann L, Bittinger SC, Klinke C. *ACS Omega*, 2018, 3: 17042–17048
- 29 Schwinghammer K, Tuffy B, Mesch MB, Wirmhier E, Martineau C, Taulelle F, Schnick W, Senker J, Lotsch BV. *Angew Chem Int Ed*, 2013, 52: 2435–2439
- 30 Huang Y, Su M, Zhou Y, Chen D, Xu Z, Zhang H, Liao C. *Ceramics Int*, 2020, 46: 26492–26501
- 31 Liao CZ, Lau VW, Su M, Ma S, Liu C, Chang CK, Sheu HS, Zhang J, Shih K. *Inorg Chem*, 2019, 58: 15880–15888
- 32 Mesch MB, Bärwinkel K, Krysiak Y, Martineau C, Taulelle F, Neder RB, Kolb U, Senker J. *Chem Eur J*, 2016, 22: 16878–16890
- 33 Wang J, Hao D, Ye J, Umezawa N. *Chem Mater*, 2017, 29: 2694–2707
- 34 Pauly M, Kröger J, Duppel V, Murphey C, Cahoon J, Lotsch BV, Maggard PA. *Chem Sci*, 2022, 13: 3187–3193
- 35 Kumar R, Mahalik JP, Silmore KS, Wojnarowska Z, Erwin A, Ankner JF, Sokolov AP, Sumpter BG, Bocharova V. *Sci Adv*, 2020, 6: eaba7952
- 36 Galuska LA, Muckley ES, Cao Z, Ehlenberg DF, Qian Z, Zhang S, Rondeau-Gagné S, Phan MD, Ankner JF, Ivanov IN, Gu X. *Nat Commun*, 2021, 12: 2347
- 37 Blair SJ, Doucet M, Browning JF, Stone K, Wang H, Halbert C, Avilés Acosta J, Zamora Zeledón JA, Nielander AC, Gallo A, Jaramillo TF. *ACS Energy Lett*, 2022, 7: 1939–1946
- 38 Browning KL, Westover AS, Browning JF, Doucet M, Sacci RL, Veith GM. *ACS Energy Lett*, 2023, 8: 1985–1991
- 39 Aliakseyeu A, Hlushko R, Sukhishvili SA. *Polym Chem*, 2022, 13: 2637–2650
- 40 Xu L, Kozlovskaya V, Kharlampieva E, Ankner JF, Sukhishvili SA. *ACS Macro Lett*, 2012, 1: 127–130
- 41 Connal LA, Li Q, Quinn JF, Tjijto E, Caruso F, Qiao GG. *Macromolecules*, 2008, 41: 2620–2626
- 42 Kim BS, Gao H, Argun AA, Matyjaszewski K, Hammond PT. *Macromolecules*, 2009, 42: 368–375
- 43 Guo Z, Chen X, Xin J, Wu D, Li J, Xu C. *Macromolecules*, 2010, 43: 9087–9093
- 44 Choi I, Suntivich R, Plamper FA, Synatschke CV, Müller AHE, Tsukruk VV. *J Am Chem Soc*, 2011, 133: 9592–9606
- 45 Chen F, Liu G, Zhang G. *J Phys Chem B*, 2012, 116: 10941–10950
- 46 Aliakseyeu A, Ankner JF, Sukhishvili SA. *Macromolecules*, 2022, 55: 8150–8161
- 47 Aliakseyeu A, Albright V, Yarbrough D, Hernandez S, Zhou Q, Ankner JF, Sukhishvili SA. *Soft Matter*, 2021, 17: 2181–2190
- 48 Kozlovskaya V, Stockmal KA, Higgins W, Ankner JF, Morgan SE, Kharlampieva E. *ACS Appl Polym Mater*, 2020, 2: 2260–2273
- 49 Hlushko R, Ankner JF, Sukhishvili S. *Macromolecules*, 2021, 54: 7469–7479
- 50 Jomaa HW, Schlenoff JB. *Macromolecules*, 2005, 38: 8473–8480
- 51 Xu L, Ankner JF, Sukhishvili SA. *Macromolecules*, 2011, 44: 6518–6524
- 52 Selin V, Ankner JF, Sukhishvili SA. *Macromolecules*, 2015, 48: 3983–3990
- 53 Zuo TS, Cheng H, Chen YB, Wang FW. *Chin Phys C*, 2016, 40: 076204
- 54 Zuo T, Ma C, Jiao G, Han Z, Xiao S, Liang H, Hong L, Bowron D, Soper A, Han CC, Cheng H. *Macromolecules*, 2019, 52: 457–464
- 55 Jiao G, Zuo T, Ma C, Han Z, Zhang J, Chen Y, Zhao J, Cheng H, Han CC. *Macromolecules*, 2020, 53: 5140–5146
- 56 Ma C, Zuo T, Han Z, Li Y, Gärtner S, Chen H, Yin W, Han CC, Cheng H. *Molecules*, 2022, 27: 3395
- 57 Qin H, Ma C, Gärtner S, Headen TF, Zuo T, Jiao G, Han Z, Imberti S, Han CC, Cheng H. *Struct Dyn*, 2021, 8: 014901
- 58 Lam CN, Do C, Wang Y, Huang GR, Chen WR. *Phys Chem Chem Phys*, 2019, 21: 18346–18351
- 59 Danielsen SPO, Bridges CR, Segalman RA. *Macromolecules*, 2022, 55: 437–449
- 60 Zhao Y, Yin R, Wu H, Wang Z, Zhai W. *ACS Macro Lett*, 2023, 12: 475–480
- 61 Beech HK, Johnson JA, Olsen BD. *ACS Macro Lett*, 2023, 12: 325–330
- 62 Wang X, He L, Sumner J, Qian S, Zhang Q, O'Neill H, Mao Y, Chen C, Al-Enizi AM, Nafady A, Ma S. *Nat Commun*, 2023, 14: 973
- 63 Liang W, Wied P, Carraro F, Sumby CJ, Nidetzky B, Tsung CK, Falcato P, Doonan CJ. *Chem Rev*, 2021, 121: 1077–1129
- 64 Zhang X, Tu R, Lu Z, Peng J, Hou C, Wang Z. *Coord Chem Rev*, 2021, 443: 214032
- 65 Yang W, Liang W, O'Dell LA, Toop HD, Maddigan N, Zhang X, Kochubei A, Doonan CJ, Jiang Y, Huang J. *JACS Au*, 2021, 1: 2172–2181
- 66 Pan Y, Li H, Farmakes J, Xiao F, Chen B, Ma S, Yang Z. *J Am Chem Soc*, 2018, 140: 16032–16036
- 67 Tan K, Pandey H, Wang H, Velasco E, Wang KY, Zhou HC, Li J, Thonhauser T. *J Am Chem Soc*, 2021, 143: 6328–6332

- 68 Manalastas-Cantos K, Konarev PV, Hajizadeh NR, Kikhney AG, Petoukhov MV, Molodenskiy DS, Panjkovich A, Mertens HDT, Gruzinov A, Borges C, Jeffries CM, Svergun DI, Franke D. *J Appl Crystlogr*, 2021, 54: 343–355
- 69 Svergun DI. *J Appl Crystlogr*, 1992, 25: 495–503
- 70 Franke D, Svergun DI. *J Appl Crystlogr*, 2009, 42: 342–346
- 71 Bichler KJ, Jakobi B, Honecker D, Stingaciu LR, Weldeghiorghis TK, Collins JHP, Schneider GJ. *Macromolecules*, 2022, 55: 9810–9819
- 72 Moon HJ, Carrillo JM, Leisen J, Sumpter BG, Osti NC, Tyagi M, Jones CW. *J Am Chem Soc*, 2022, 144: 11664–11675
- 73 Alesadi A, Cao Z, Li Z, Zhang S, Zhao H, Gu X, Xia W. *Cell Rep Phys Sci*, 2022, 3: 100911
- 74 Elliott JP, Osti NC, Tyagi M, Mamontov E, Liu L, Serrano JM, Cao K, Liu G. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2022, 14: 36980–36986
- 75 Laskoski M, Dyatkin B, Osti NC, Keum JK, Mamontov E, Butler T. *J Polym Sci*, 2023, 61: 132–142
- 76 Choi C, Ashby DS, Butts DM, DeBlock RH, Wei Q, Lau J, Dunn B. *Nat Rev Mater*, 2020, 5: 5–19
- 77 Cui J, Kobayashi T, Sacchi RL, Matsumoto RA, Cummings PT, Pruski M. *J Phys Chem B*, 2020, 124: 9931–9937
- 78 Osti NC, Thapaliya BP, Matsumoto RA, Bansal A, Lin X, Cummings PT, Tyagi M, Dai S, Mamontov E. *J Phys Chem Lett*, 2022, 13: 2845–2850
- 79 Osti NC, Dyatkin B, Gallegos A, Voneshen D, Keum JK, Littrell K, Zhang P, Dai S, Wu J, Gogotsi Y, Mamontov E. *J Electrochem Soc*, 2019, 166: A507–A514
- 80 Lundin F, Aguilera L, Hansen HW, Lages S, Labrador A, Niss K, Frick B, Matic A. *Phys Chem Chem Phys*, 2021, 23: 13819–13826
- 81 Zhang Y, Wan G, Lewis NHC, Mars J, Bone SE, Steinrück HG, Lukatskaya MR, Weadock NJ, Bajdich M, Borodin O, Tokmakoff A, Toney MF, Maginn EJ. *ACS Energy Lett*, 2021, 6: 3458–3463
- 82 Gupta S, Schneider GJ. *Soft Matter*, 2020, 16: 3245–3256
- 83 Chakraborty S, Doktorova M, Molugu TR, Heberle FA, Scott HL, Dzikovski B, Nagao M, Stingaciu LR, Standaert RF, Barrera FN, Katsaras J, Khelashvili G, Brown MF, Ashkar R. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2020, 117: 21896–21905
- 84 Rao A, Yao H, Olsen BD. *Phys Rev Res*, 2020, 2: 043369
- 85 Goswami M, Iyiola OO, Lu W, Hong K, Zolnierczuk P, Stingaciu LR, Heller WT, Taleb O, Sumpter BG, Hallinan Daniel T. *Macromolecules*, 2023, 56: 762–771
- 86 Jakobi B, Bichler KJ, Sokolova A, Schneider GJ. *Macromolecules*, 2020, 53: 8450–8458
- 87 Richter D, Farago B, Fetters LJ, Huang JS, Ewen B. *Macromolecules*, 1990, 23: 1845–1856
- 88 Rathgeber S, Monkenbusch M, Kreitschmann M, Urban V, Brulet A. *J Chem Phys*, 2002, 117: 4047–4062
- 89 Nettekheim F, Wagner NJ. *Langmuir*, 2007, 23: 5267–5269
- 90 Richter D, Hayter JB, Mezei F, Ewen B. *Phys Rev Lett*, 1978, 41: 1484–1487

Applications of neutron scattering in chemical measurement science

Han Zehua^{1,2}, Zuo Taisen^{1,2*}, Ma Changli^{1,2}, Li Yuqing^{1,2,3}, Cheng He^{1,2*}

¹ China Spallation Neutron Source, Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Dongguan 100049, China

² Spallation Neutron Source Science Center, Guangdong 523800, China

³ University of Chinese Academy of Science, Beijing 100049, China

*Corresponding authors (email: zuots@ihep.ac.cn; chenghe@ihep.ac.cn)

Abstract: The characteristics of neutron make it play a unique role in chemical measurement science. Neutron interacts directly with nucleus, thus has strong penetrability, which makes *in-situ* measurements possible in complex sample environments; neutron is sensitive to light elements and isotopes, and thereby can observe the internal structures selectively; the wavelength and the energy of neutron are consistent with the typical distances and the characteristic relaxation time on atomic scales, so neutron scattering can cover a multi-scale space/time range. However, due to the lack of large neutron facility, our development in the field of neutron scattering is relatively slow. China Spallation Neutron Source (CSNS) has been accepted in 2018, and is now open to users worldwide. In order to develop users and help them to have a basic understanding of neutron scattering, the manuscript introduces both the elastic and quasi-elastic neutron scattering, separately. Elastic neutron scattering, including neutron diffraction, neutron reflection and small-angle neutron scattering, can measure length scale from 0.01 Å to 1 μm; quasi-elastic neutron scattering, including neutron backscattering and neutron spin echo, can measure characteristic relaxation time from 1 ps to 300 ns. In this paper, we introduce the typical applications of these scattering methods in the fields of coordination chemistry, polymer chemistry, physical chemistry, electrochemistry and biochemistry, *etc.* We hope that neutron scattering, as a powerful tool, can be further promoted in China, and serve the future development in our chemical field.

Keywords: elastic neutron scattering, quasi-elastic neutron scattering, chemical measurement science

doi: [10.1360/SSC-2023-0121](https://doi.org/10.1360/SSC-2023-0121)