國家同步輻射研究中心
出國報告書

出國人姓名：**莊裕鈞、陳柏豪**

出國日期：**2026/02/09 至 2026/02/12**

目的地 (國家、城市)：**日本 SPring-8**

參加會議名稱或考察、研究訓練地點：

SPring-8 BL12B2/BL04B2/BL13XU
運轉模式考察與成對分布散射技術討論

一、與會目的:

本次參訪旨在了解 SPring-8 台灣光束線於執行「成對分布函數（Pair Distribution Function, PDF）」用戶實驗時段期間，其數據收集流程與實驗技術細節之優化與提供改善建議。同時規劃並參與五場討論會議，與**Taiwan Beamline Office 同仁**——『平岡望』副研究員、『石井啟文』助研究員、『邵禹成』助研究員，以及 BL04B2『山田大貴』主幹研究員、『下野聖矢』研究員、BL13XU『河口彰吾』主幹研究員，並與**島根大學**『尾原幸治』教授與『大政義典』特任助教等學者，針對不同主題進行深入交流與討論。透過上述活動，進一步了解 BL12B2、BL04B2 與 BL13XU 現行之運轉模式、用戶實驗型態及其數據收集的整體概念，並就 SPring-8 全散射實驗之相關技術進行深度交流，作為 TPS 19A2 光束線開發之重要對照與技術提醒。

二、討論行程:

02/09　台灣前往日本SPring-8

02/10　**討論一**：Taiwan Beamline Office同仁，於實驗站現場了解BL12B2運轉內容、基礎樣品量測與用戶實驗數據轉換流程。（9:30至12:30）

02/10　**討論二**：BL04B2『山田大貴』主幹研究員和『下野聖矢』研究員，討論高能X光實驗站所帶來的優勢與挑戰。（14:00至15:15）

02/10　**討論三**：BL13XU『河口彰吾』主幹研究員，於實驗站現場討論CdTe型態偵檢器數據量測的細節與SPring-8 data center分享。（15:30至17:00）

02/10　**討論四**：島根大學『大政義典』特任助教，於BL12B2實驗站現場釐清用戶數據轉換程序。（19:00至20:00）

02/11　**討論五**：島根大學『尾原幸治』教授，於BL04B2實驗站現場討論，了解教授團隊如何協助BL12B2，並且討論未來於BL12XU與TPS19A進行實驗的可能性。（09:30至11:10）

02/12　日本回台灣

三、內容摘要：如附件所記載之五場討論會議記錄。

四、心得概述與建議：

本次參訪 SPring-8 數個全散射光束線實驗站，是為審視並明確工作任務目標的重要契機。透過實地參與用戶實驗時段，與台灣光束線同仁、數位日本 SPring-8 光束線學者（山田大貴、下野聖矢、河口彰吾、尾原幸治及大政義典）進行深度技術研討，處於在國際合作與學術交流的高度，重新理解 SPring-8 BL12B2 與 TPS 19A2 在高能量 X 光實驗上的開發進程。在交流過程之中，觀察到日本學者對於全散射強度統計的嚴謹度，以及針對不同感測器能量進行二維偵測器平場校正的技術堅持，這些實務經驗對 TPS19A2 開發 Eiger2 CdTe 2MW 模組系統整合及未來提升至 35 keV 以上的實驗規劃具有高度參考價值。同時，藉由對比 bluesky、pyFAI 與 GSAS-II 工具的優勢，我們更加確定優化數據與自動化流程是提升國際競爭力的關鍵。

非常感謝中心的支持，使得我們能促成與世界各地的學者交流的機會，報告現階段研究成果並接受多方檢視與建議，這不僅提升了自己的國際能見度，更為未來的跨國合作（如 SPring-8 II 升級期間的 TPS 合作計畫）奠定了堅實基礎。這些寶貴的經驗已轉化為我持續進步的動力，未來將致力於將所得技術回饋於中心，推動同步輻射研究之卓越化。

討論一

SPring-8 BL12B2 台灣光束線全散射運轉模式考察

時間： 2026 年 02 月 10 日 上午 09:30

與會者： 莊裕鈞、陳柏豪、平岡望、邵禹成、大政義典

一、 BL12B2 全散射運轉摘要

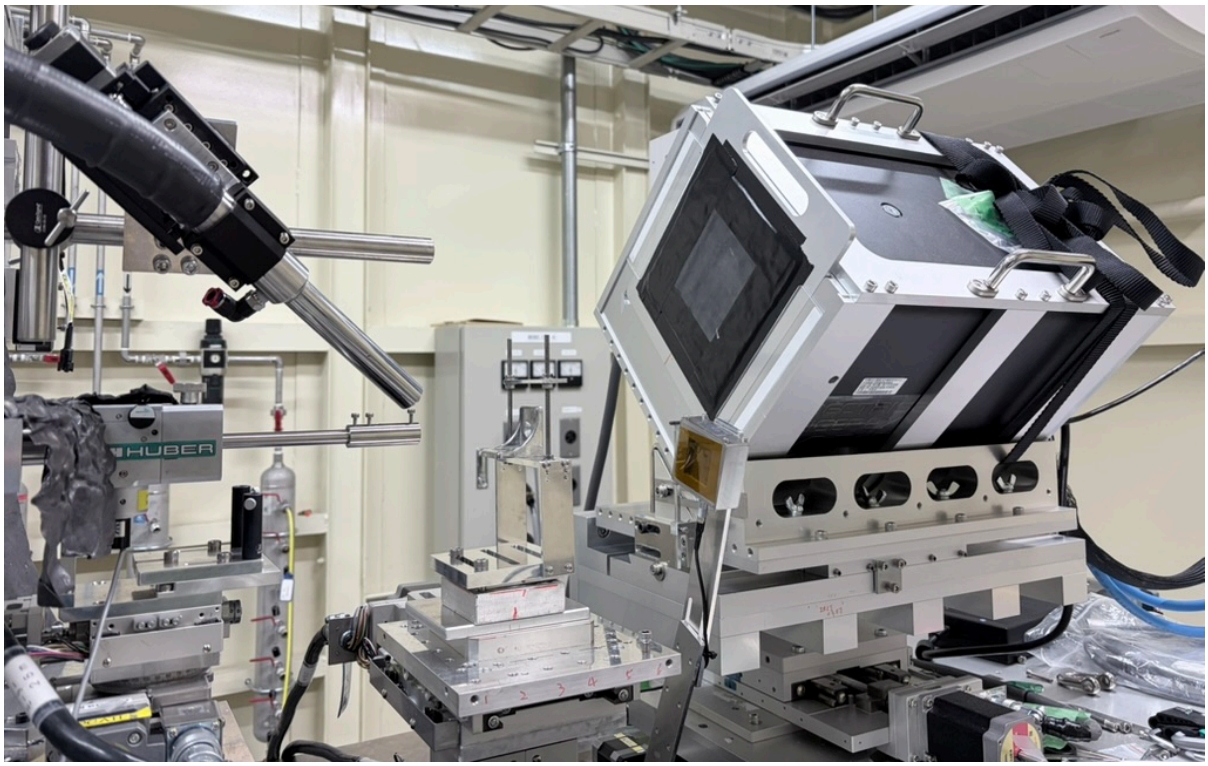
1. **控制與監控**:實驗操作主要透過 spec 下達指令進行樣品位置掃描，並利用 PyMca 軟體繪製，樣品確認數據狀態。
2. **批次指令數據收集**：透過巨集指令（macro collection）進行批次或自動化的數據擷取。二維偵測器旋轉 45 度，爭取與 X 光入射光垂直方向的收集面積，提供更高的散射向量（Q）數據收集。
3. **二維數據格式轉換**：實驗使用 Eiger 偵測器並取得 H5 格式檔案，隨後利用石井研究員撰寫的套件將 H5 格式轉換為 TIFF 格式，以進行後續處理。
4. **二維數據積分與校正**：使用由英國 DLS (Diamond Light Source) 所開發的 DAWN 軟體進行數據分析與積分校正。
5. **實驗站與能量設定**：使用能量為 66 keV。X 光能量與實驗幾何可經過多重樣品至偵測器距離（Area detector calibration with multiple distances）的校準。
6. **傅立葉數據分析與軟體**:使用 BL08W 實驗站所提供專門的數據傅立葉轉換軟體供用戶於站上使用，該軟體需要透過 Igor 平台軟體（需要付費授權）方能運作。

7.**數據保存與用戶存取：**用戶使用個人雲端空間上傳資料，自行管理。

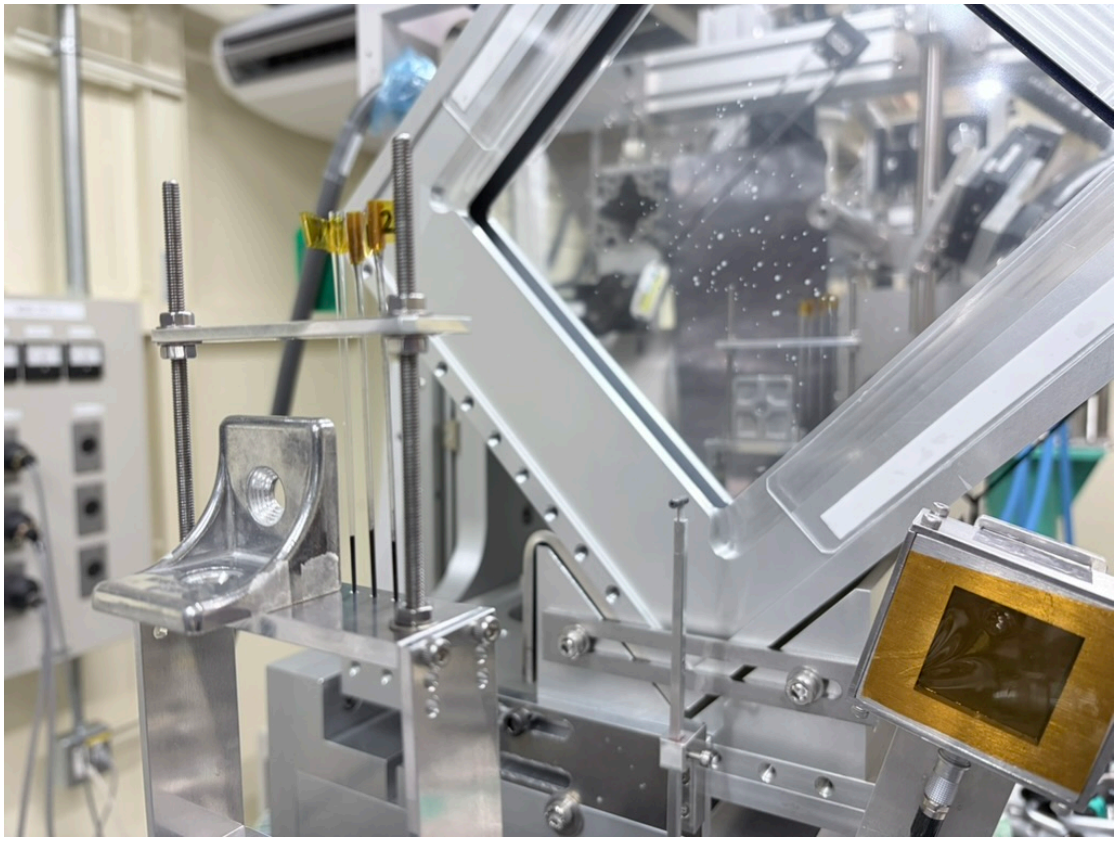
二、 實驗數據處理流程之現況分析與優化建議

1. 現行流程跨越了多個軟體平台，包含 spec 與 PyMca(控制與即時確認）、DAWN（校正積分）以及 Igor Pro（數據分析與數據傅立葉轉換軟體）。這種分散式的軟體配套在操作上較不直觀，且新版 Igor Pro 受限於 Windows 作業系統環境與付費授權之限制，對於未來技術的普及與跨團隊合作推廣而言，存在較高的門檻與不便。

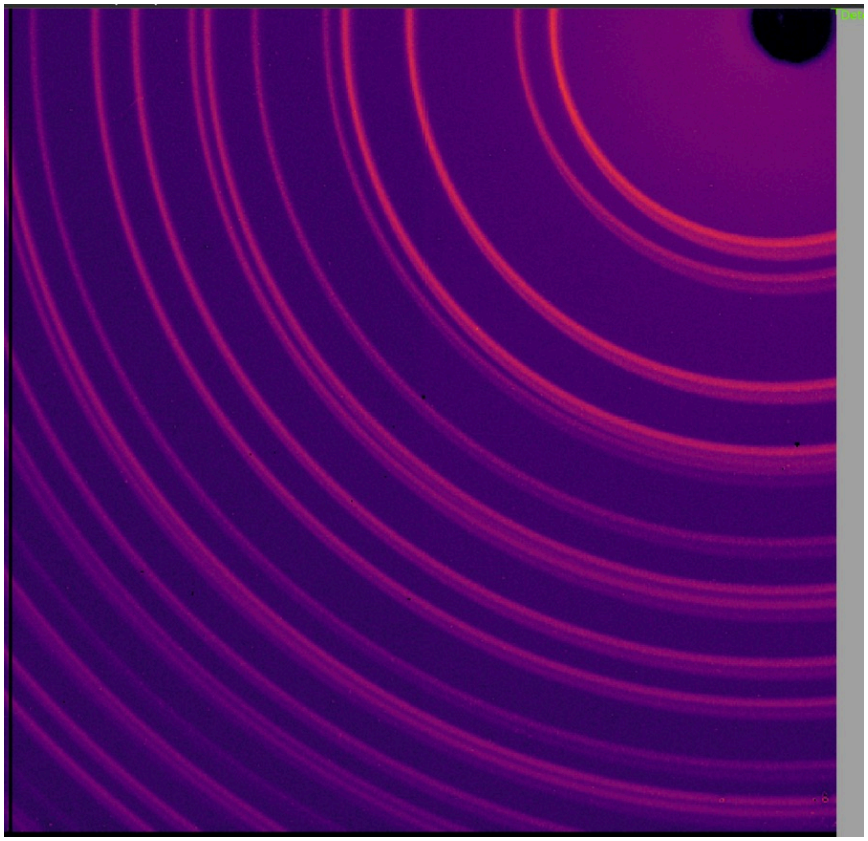
2. 格式轉換不僅增加硬碟空間負荷，且自定義套件的維護與相容性（如 Metadata 是否完整保留）是潛在風險。若轉換過程發生資訊遺失，將影響後續積分的精確度。
3. 在數據校正過程中，觀察到光斑定義面臨一定程度的挑戰。具體表現於標準品繞射訊號中，存在明顯的繞射環重疊現象，這可能對於一般樣品全散射的結構因子（Structure Factor）的萃取精確度造成干擾，需進一步優化光路幾何校正。
4. 在數據保存方面，目前尚未完全整合利用 SPring-8 現有的 Data Center 雲端儲存資源，若能導入雲端化管理，將有助於數據的安全備份與遠端協作。
5. 參考 TPS 19A 實驗站之運轉實務，是透過 python 為核心的 bluesky 數據收集架構與快速方位角積分套件 pyFAI，使得系統可直接讀取 H5 或 TIFF 檔案進行即時校準與積分，或是 Scriptable GSAS-II(可編寫腳本版本，非圖形界面版本)。若能借鏡此經驗，將校準到積分的流程自動化並集中化，不僅能大幅縮減軟體切換的時間成本，更能確保數據從收集到傅立葉轉換過程之中的一貫性與精確度。



圖一，BL12B2 全散射實驗站配置，多毛細管平移載台與二維偵測器（45 度傾轉式配置）。



圖二，BL12B2 全散射實驗配置近照。



圖三，光斑定義面臨一定程度的挑戰，表現於標準品（CeO_2）繞射訊號中，存在明顯的繞射環重疊現象。

討論二

SPring-8 BL04B2 運轉模式與成對分布散射技術討論

時間： 2026 年 02 月 10 日 下午 02:00

與會者： 莊裕鈞、陳柏豪、山田大貴、下野聖矢

一、 BL04B2 儀器背景與技術摘要

SPring-8 的 BL04B2 光束線專為高能繞射與散射實驗設計，其光源來自彎曲磁鐵，透過固定遮罩將水平發散角限制在 0.73 mrad。系統配置一套單跳式彎曲晶體單光儀，在布拉格角固定為 3 度的情況下，選用 Si(511)晶體產生 113.4 keV 的高能 X 光。該單光儀可調節彎曲半徑，將焦點精確定位於樣品目標位置內，水平式繞射儀搭配四組 CdTe 與三組 Ge 偵測器，以利散射強度高效率統計，執行 PDF 實驗設定。

二、 113.4 keV 實驗設定與數據品質

在高 X 光能量環境下，X 光與狹縫等光學物件互動易產生散射與螢光干擾，定義光斑時需小心避免。若樣品含 Pb 或 Bi 等重元素，量測需格外留意。實驗幾何校正必須精確確認樣品至偵測器距離(Sample-to-detector distance)，並選用直徑介於 0.7 mm 至 1.0 mm 的毛細管。目前系統具備優異的訊雜比(S/N)，技術重心在於散射強度的整體統整統計，而非峰形(Peak Profile)細節。雖然臨場溫度變化實驗中背景差異量測具挑戰性，但良好的統計強度能確保結構資訊提取的準確性。

三、 數據傅立葉轉換軟體與機構影響討論

針對數據處理，會中請教山田博士所提供編寫的網頁軟體 webPDF 與哥倫比亞大學 Simon Billinge 教授主導的 PDFgetX2 等工具有何不同。經確認，不同軟體間在數據傅立葉轉換與整體數據處理的方法論上邏輯高度一致。散射數據的量測，可以透過二維偵檢器收集二維散射訊號，方位角面積積分（Azimuthal angle integration）或是全面積積分（full area integration）提升數據統計效果，從單光儀來的入射 X 光與偵測器的機構關係尤為重要，若涵蓋了部分水平方向的散射數據，需要套用極化因子（Polarizability factor）降低散射數據積分的影響。

網頁軟體運算架構方面，山田博士利用 PyScript 套件將計算函式定義於網頁中，數據計算時直接取用使用者端的本地資源，藉此提升用戶於實驗前預習彈性與實驗中及時處理的能力。

四、 SPring-8 II 升級規劃與展望

光束線升級計畫預計將單光儀晶體更換為 Si(422)，目標獲得 2 倍的光通量。雖受限於彎曲磁鐵強度下修，升級初期 Flux 可能暫降至原有的一半，但長遠來看，隨著 BL08W/BL08XU 將插件磁鐵由 Wiggler 更換為 Undulator，預期整體光強度將有大幅提升，達到現有的 10 倍以上。此外，會中亦提及 X 光路徑真空管雖能有效抑制空氣散射，但因設備重，目前僅在具備高通量功能的配置下使用。

五、考察與對比

作為對比，目前 19A 已具備利用 MYTHEN 系統收集數據並且利用相較精簡的 PDFgetX3 版本，作為數據傅立葉轉換的核心。散射數據收集後，即可即時轉換數據，降低用戶理解該技術的入門門檻。

討論三

SPring-8 BL13XU 運轉模式與成對分布散射技術考察

時間： 2026 年 02 月 10 日 下午 15:30

與會者： 莊裕鈞、陳柏豪、河口彰吾

一、 偵測器配置與平場校正需求

BL13XU 實驗站進行數據收集，偵測器採用六組 Lambda 750K 模組偵測器組合。針對 CdTe 偵測器之特性，會中強調需針對不同能量進行極為精細的平場校正(Flat-field Correction)，以確保數據的均勻度與二維數據積分轉換至一維數據之精確度。

二、 樣品規範與自動化放樣系統整合

針對自動化放樣品系統的運作，用戶需依照「準備清單」提供標準化樣品。具體規範如下：

1. 樣品特性：結晶樣品(Crystalline sample)建議能量為 35 keV；非晶質樣品(Amorphous)則建議使用 60 keV。皆由 Si(311)提供光源。
2. 樣品尺寸：晶體粉末長度為 30 mm。
3. 樣品均勻方式：掃描時轉速設定為 100 rpm。

此外，系統導入了毛細管自動對齊（Capillary Alignment）功能，透過背景光源結合反射鏡成像技術，達成高效能的樣品中心定位。

三、 多模組數據合併與擷取挑戰

由於樣品到偵測器的距離（Sample-to-detector distance）可變，單次掃描擷取的 2θ 角度資訊量受限，因此需要增加掃描組數以進行後續的數據合併（Regrid and Merge）處理。必須要針對不同樣品到偵測器的距離，取得不同距離的幾何校正參數，將校正後的數據完整合併。

四、 數據管理與雲端存取機制

實驗數據將統一整合至 SPring-8 Data Center 進行管理。用戶需事先申請個人帳號，系統將針對每個研究計畫建立獨立的資料夾存取空間，確保數據的安全備份與權限控管。

討論四與討論五

SPring-8 BL13XU 運轉模式與成對分布散射技術考察

時間： 2026 年 02 月 10 日下午 19:00；2026 年 02 月 11 日上午 09:30

與會者： 莊裕鈞、陳柏豪、尾原幸治、大政義典

一、 日本學者於實驗站協助與交流

1. BL12B2 現場技術指導：島根大學大政義典特任助教於 BL12B2 實驗站現場協助用戶釐清數據轉換程序。
2. 全散射實驗站優化討論：島根大學尾原幸治(Koji Ohara)教授團隊說明其支援 BL12B2 運作之現況。
3. 實驗效能評估：教授指出，於先前台灣光束線升級計劃審查初期，曾建議若執行全散射實驗，BL12XU 具備更高的 X 光入射強度與更好的統計效率，是更為合適的選擇。
4. 未來訪問與 TPS 合作計劃：因應 SPring-8 未來升級期間將停機一年半，教授提及未來訪問台灣 TPS 的計劃，並探討於 TPS 19A 進行高解析度粉末繞射與全散射實驗之可行性。

二、 TPS 19A2 實驗規劃建議

1. 異常散射 PDF 實驗：針對 TPS 19A 討論進行異常散射 PDF (Anomalous Scattering PDF) 之實驗規劃。
2. 能量提升之優勢：TPS 19A 目前使用 28.5 keV，未來若升級至 Eiger2 CdTe 2MW 系統，能量有機會提升至 35 keV，將有利於針對特定元素進行異常散射研究。參考先前 TPS 19A 於 24.5 keV 進行之 Pd 元素高解析度繞射實驗經驗，於激發能量前後進行繞射數據量測的經驗延伸。

三、 散射統計與偵測器技術要求

1. 康普頓散射（Compton Scattering）：強調在數據還原過程中，康普頓散射背景需要被精確統計以維護數據品質。
2. 偵測器能量選擇性：強調偵測器具備能量鑑別（Energy Selectivity）功能之重要性，以排除非必要干擾。
3. 能量門檻上下限（Threshold）設定：建議將能檻優化調整至「入射光能量 E_{in}」至「E_{in} - 5 keV」之間，此範圍可獲得最佳量測效果。