

看見原子如何排列— TPS 20A二維X光繞射光束線

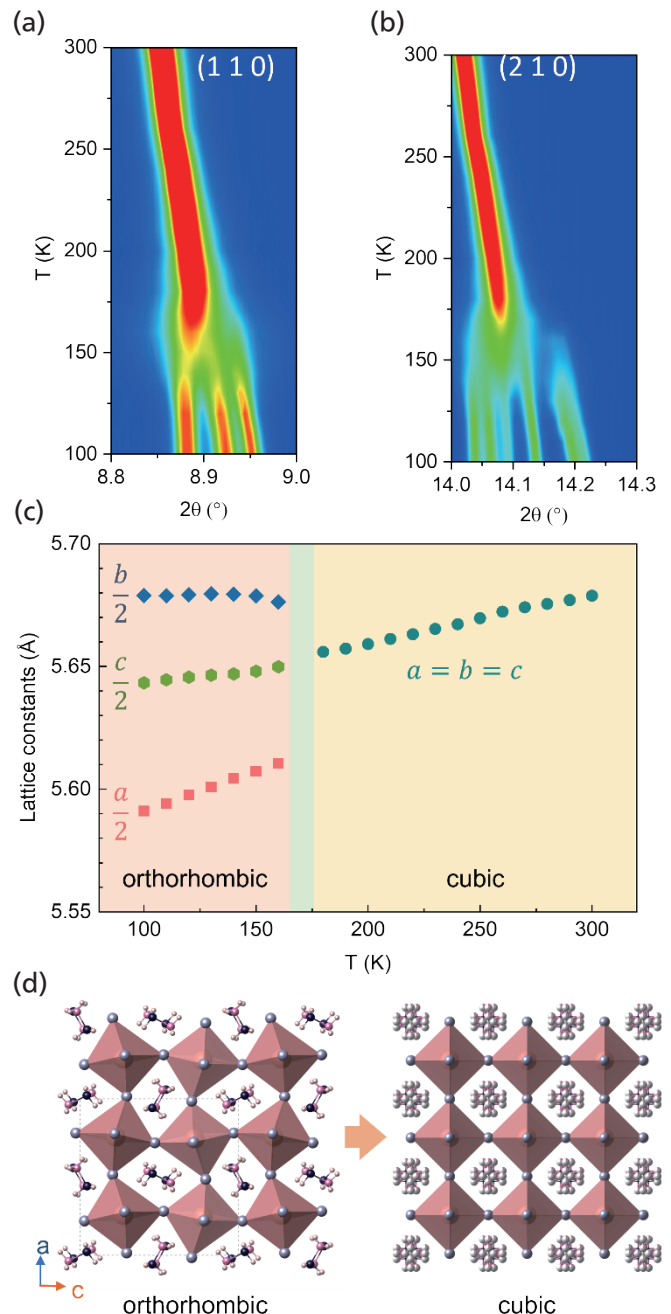
賴彥仲博士

國家同步輻射研究中心材料科學小組

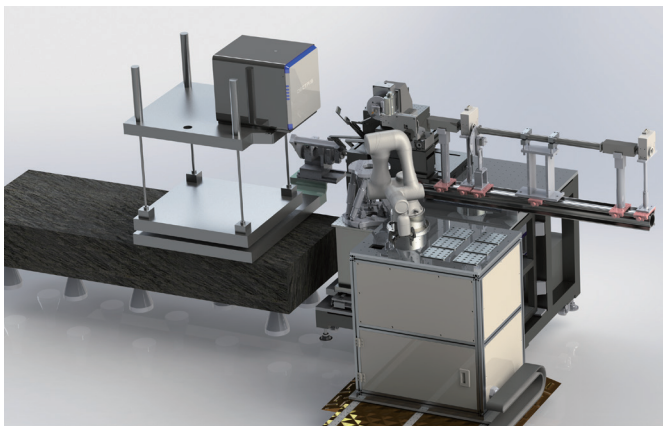
當代科學技術的迅速發展，離不開對材料性質的深入理解與掌握。材料的化學性質與物理性質與其晶體結構密切相關，而這種結構往往會隨著環境條件的改變而產生變化。舉例來說，當材料受到加熱、施壓、或照光等外部刺激時，原子在晶體中的排列可能會發生改變，進而影響導電性、磁性或反應能力等性質。因此，研究材料在不同環境下的結構變化，是材料科學中一項至關重要的課題。

要觀察材料的晶體結構，X光繞射 (X-ray Diffraction, XRD) 是一項非常成熟且廣泛使用的工具。尤其是單晶 XRD，可精確分析單一晶體內部原子的排列情形。然而，單晶樣品通常體積微小，難以施加均勻的熱、壓力或電場等外界條件，因此當研究對象涉及操作環境中的結構演變時，單晶的使用即具侷限。相較之下，粉末樣品因容易製備，且可在加熱、施壓、調節氣氛等實驗條件下操作，因此成為研究結構轉變的首選。透過粉末 XRD，不僅可以觀察材料是否發生結構相變，也能解析如 Jahn-Teller 效應引起的晶格畸變 [1]，或是有序-無序變化對材料穩定性與功能的影響。例如，混合有機-無機鈣鈦礦 MAPbCl_3 在低溫下具有正交晶系結構，當溫度上升至約 168.9 K 至 174.8 K 時，會發生顯著的結構相變，轉變為高對稱性的立方晶系。這一過程中， MA^+ 有機陽離子的轉動自由度顯著增加，並造成 PbCl_6 八面體框架的動態扭曲，不僅改變晶格常數，也影響其熱傳導機制與材料功能。透過變溫粉末 XRD 可清楚觀察繞射峰的分裂與位移，進而揭示相變行為，是溫控材料與相變研究的重要範例之一，如圖一所示 [2]。

TPS 20A 二維 X 光繞射光束線將於近期建置完成。此光束線承襲 TLS 01C2 的成功經驗，並針對現代材料研究的多樣化需求進行全方位升級。TPS 20A 採用偏轉磁鐵 (bending magnet) 產生同步輻射光，主要 X 光能量範圍為 8-30 keV。在偵測系統方面，TPS 20A 採用高效能的 Eiger2 S 16M photon counting 二維偵測器，具備 $327.8 \times 311.2 \text{ mm}^2$ 的有效大面積感測區及 $75 \times 75 \mu\text{m}^2$ 的高解析像素。與傳統影像板 (image plate) 系統相比，此偵測器大幅提升了動態範圍與數據收集效率，同時有效降低背景雜訊，可快速且即時獲得高品質的繞射圖譜。偵測器亦安裝於可移動平台上，能依需求調整樣品與偵測器之間的距離與直射光遮蔽位置，提供高度的靈活性。



圖一 MAPbCl_3 的粉末 XRD 數據隨著溫度的變化。(a-b) (110) 及 (210) 的繞射等高線圖。(c) 經格常數隨著溫度再相變前後的變化情形。(d) 從立方相到正交相的結構轉變導致晶格畸變的圖示。



圖二 二維 X 光繞射光束線實驗站示意圖。

在樣品支撐系統方面，TPS 20A 採用整合式多功能平台，結合毛細管自動校正系統與六軸精密平台 (hexapod)。毛細管樣品可透過自動定位系統快速準確地架設，並可與機械手臂整合，實現高通量的自動操作。對於如薄膜、平面材料、鈕扣電池等非常態樣品，六軸精密平台則提供穩定、精細的六軸調整能力，以因應複雜的實驗條件。

整體而言，TPS 20A 二維 X 光繞射光束線不僅強化了偵測器效率與樣品支援能力，更拓展了 X 光粉末繞射技術於功能材料、能源材料與低維結構等前沿領域的應用深度。其實驗設計支援多種操作環境下的原位測試，包括溫度控制、壓力變化、氣體流動、電化學反應與電池充放電等臨場實驗，對於深入探索材料結構與性質之間的關聯具有重要助益。

未來，本中心所屬的兩條粉末繞射光束線 TPS 20A 與 TPS 19A 將朝向功能分流的方向發展，逐步明確區分實驗類型與應用範疇。TPS 19A 將發揮其高 X 光通量與寬能量範圍的優勢，聚焦於高解析度粉末繞射等結構精修實驗；而 TPS 20A 則將專注於具特殊需求之實驗條件，如較長反應時間、變溫控制、原位追蹤等複雜實驗設計。用戶可參考表

表一 TPS19A 以及 TPS20A 光束線特性比較。

	TPS 20A	TPS 19A1
能量範圍	10 - 25 keV	10 - 40 keV
偵檢器系統	二維大面積偵檢器 (Eiger2 S 16M)	線性 / 點偵檢器 (MYTHEN 18K/ Multi-crystal analyzer)
解析度	中 - 高	高 - 超高
適合樣品類型	粉末毛細管、薄膜、電池及塊材等	粉末毛細管為主
臨場環境設備	熱風槍、氮氣致冷系統、電位儀、氣體裝載系統及高溫腔體等	

一前列之光束線特性比較，依據實驗需求選擇最適合之光束線進行申請。

作為台灣同步輻射研究設施的重要進展，TPS 20A 二維 X 光繞射光束線的建置代表著國內材料結構分析能力的重大躍升。此光束線提供一個功能強大且高度多元的實驗平台，將促進新材料的研發並深化跨領域合作研究。預計將於 2025 年下半年完成建置後進行出光測試與用戶實驗邀請，並於 2026 年第一季正式開放外部用戶申請使用。

參考文獻：

1. Malcolm A. Halcrow, Chem. Soc. Rev. **42**, 1784 (2013).
2. Jia-Kai Hu et al., Small **21** (4), 2408773 (2025).

用戶資訊

實驗計畫申請

■ 2026-1 期實驗開放申請

2026 年第一期 (2026 年 1 - 6 月) 光束線使用於 2025 年 7 月初開放申請，截止日期為 2025 年 8 月 15 日 (五)，歡迎計畫主持人踴躍上網申請。

明年即將開放光束線如下

- TPS 27A2 Photoelectron Related Image and Nano-Spectroscopy (軟 X 光光電子能譜顯微術)
- TPS 20A1 Two-dimensional X-ray Diffraction (二維 X 光繞射)

近期光束線將退場 / 搬遷如下

- TLS 16A1 BM-Tender X-ray Absorption, Diffraction 光束線將於 2026-1 期退場，用戶可移轉至 TPS 32A1 進行實驗。
- TLS 21B1 U90-(CGM) Angle-Resolved UPS 光束線將於 2026-1 期退場，用戶可移轉至 TPS 39A1 進行實驗。
- TPS 09A2 Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy (HAXPES) for Semiconductor 實驗站搬遷，故於 2026-1 期暫停服務。