

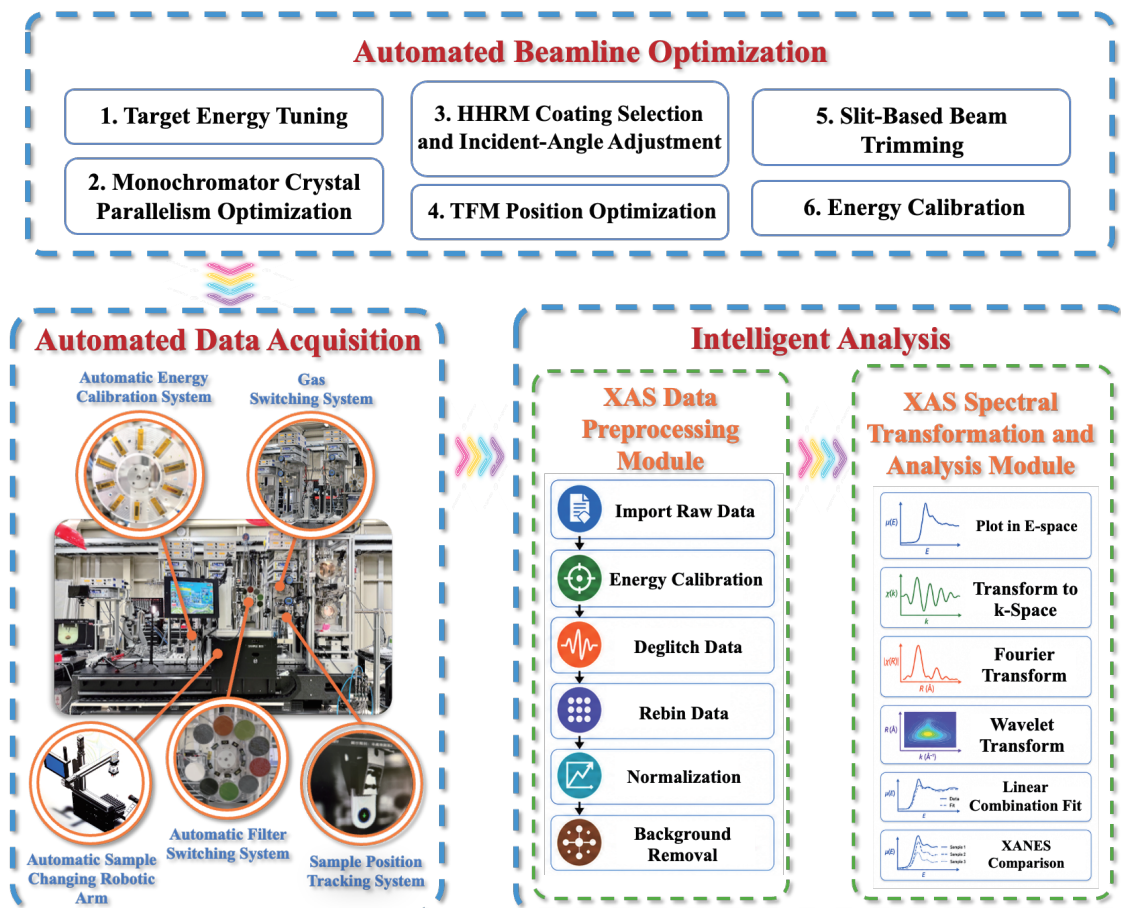
TPS 32A 柔X光吸收光譜光束線： 自動化量測與智慧分析系統之開發

盧英睿、彭柏洋、陳啓亮、梁成志
國家同步輻射研究中心實驗設施組

得益於同步輻射光源可提供高亮度且能量連續可調的 X 光光源，X 光吸收光譜已成為探測材料電子結構與局域結構的重要技術。其中，X 光吸收近邊緣結構 (XANES) 可解析氧化價數與局域結構對稱性；延伸 X 光吸收精細結構 (EXAFS) 則可提供配位原子的種類、配位數、鍵長與亂度等資訊。由於此技術具有元素選擇性，且待測樣品可為晶體、非晶體、粉末、薄膜、液體甚至氣體，因此已被廣泛應用於化學、催化、能源材料、環境科學及凝態物理等領域。

TPS 32A 為一座柔 X 光吸收光譜光束線，建置目的在於銜接軟 X 光與硬 X 光光束線經常不易兼顧的能量區間。其操作能量範圍為 1.7 - 11 keV，涵蓋 Si 至 Zn 等元素的 K-edge、4d 元素與鐳系元素的 L-edge。TPS 32A 採用偏轉磁鐵光源，並以水冷式雙晶單色儀作為分光核心，其中配置

InSb(111) 與 Si(111) 晶體，以兼顧低能量可及性與能量解析度需求。然而，對 XAS 實驗而言，光束線具備合適的光學架構僅是取得優質數據的基礎；實際進行量測時，如何在每一次掃描前將光束線光源狀態調整至最佳條件，乃是取得可靠實驗數據的關鍵。TPS 32A 實驗站目前已導入快掃模式 (fly-scan)，透過單色儀連續掃描與偵測器同步收集訊號，取代傳統逐點停留的步進掃描模式 (step-scan)，可大幅縮短量測時間，將原本在 TLS 16A 約 40 分鐘的量測有效加速；其中，穿透模式約可於 1 分鐘內完成，螢光模式約需 8 分鐘，且數據品質仍可維持與傳統掃描相近。也正因 fly-scan 大幅提升了單次光譜掃描速度，在相同的光束線時段內，使用者便能安排更多樣品，因而更常需要進行樣品更換，並依不同待測元素重新最佳化光源條件；同時，後續需要進行分析的數據量也隨之增加。



圖一 TPS 32A 自動化與智慧化 XAS 光束線系統示意圖，整合自動化調光、自動化量測系統與智慧化數據分析。

基於上述需求，TPS 32A 已進一步建置涵蓋自動化調光、自動化量測與智慧化分析三個層面的整合式工作流程（圖一）。換言之，光束線硬體的建置與快速掃描能力提供了基礎，而真正能降低用戶操作光束線的學習門檻，並減少操作疏漏的關鍵，則是將這些繁瑣卻關鍵的實驗步驟轉化為可重複執行的自動化流程。TPS 32A 的自動化調光系統，可根據用戶選擇的待測元素，完成目標能量移動、單色儀晶體平行度最佳化、高諧波抑制鏡 (HHRM) 之鍍膜與入射角調整、超環面聚焦鏡 (TFM) 位置最佳化、狹縫砍光，以及能量校正等程序。自動調光完成後，接續要整合的便是實驗站端的自動化量測流程。整套自動化量測系統整合了游離腔體切換裝置、標準樣品切換裝置、機械手臂、螢光偵測器濾片切換裝置與樣品位置定位系統。其中，游離腔切換裝置可依待測元素的能量選擇合適的游離腔；標準樣品切換裝置則可在量測不同元素時自動切換至對應標準品，以利能量校正；螢光濾片切換裝置則依待測元素切換合適濾片，以降低彈性散射背景。另一方面，自動樣品交換系統可將多達 100 個樣品預先安裝於樣品盤中，再由機械手臂依照量測清單順序送至量測位置，並配合影像定位系統自動完成光點與樣品的對位。此架構串接自動化調光與量測系統，並結合 fly-scan，有助於實現高通量連續量測。

在完成自動化調光與量測後，第三個關鍵則是智慧化分析。快速掃描雖然能在短時間內產生大量光譜，但若後續仍完全仰賴人工逐一進行數據處理，將會消耗大量時間。基於此考量，TPS 32A 將整合式光譜分析平台納入後續工作流程之中，除了一般的能量校正、壞點移除與背景處理外，亦包含小波轉換分析、XANES 光譜資料庫比對與線性組合擬合等功能。至於 EXAFS 結構解析，其困難之處往往不僅在於取得振盪訊號，而是如何將光譜與合理的結構模型連結並進行擬合。為此 TPS 32A 未來計畫朝向更完整的智慧化結構分析流程發展，逐步導入晶體結構資訊檔 (CIF) 搜尋、散射路徑計算產生、候選模型篩選以及機器學習輔助結構擬合等功能。當候選模型數量眾多，或擬合參數空間過於龐雜時，透過機器學習輔助方法可協助搜尋合理的參數組合與模型選擇，進而縮短由原始光譜走向結構判讀所需的時間，並讓使用者在面對複雜 EXAFS 擬合問題時，能以更有效率且更一致的方式探索可能的結構。

對使用者而言，一座光束線的價值不僅在於具備足夠的光通量、符合實驗需求的能量解析度與乾淨的入射光，也包括能否將這些光源優勢有效轉化為高效率、高通量的量測流程。TPS 32A 光束線藉由整合自動化光束線控制、自動化量測系統、fly-scan 與智慧化數據分析平台，推動 XAS 光束線朝自動化、智慧化與高通量量測方向發展，協助使用者以更有效率方式取得可靠光譜，並快速解析其中的電子結構資訊。藉此，研究人員能從繁瑣的操作與耗時的分析中解放，專注於前瞻科學的探索與突破。

用戶資訊

實驗計畫申請

2027-1 期實驗開放申請

2027 年第一期 (2027 年 1 - 6 月) 光束線使用於 2026 年 7 月初開放申請，截止日期為 2026 年 8 月 17 日 (一)，歡迎計畫主持人踴躍上網申請。

會議/課程

- 第十五屆 X 光科學暑期學校 (8 月 18 日至 21 日)
- X 光斷層掃描與三維資料分析工作坊 (8 月 24 日)
- 第三十二屆用戶年會暨研討會 (8 月 25 日至 27 日)
- X 光吸收光譜暑期訓練營 (8 月 28 日)
- 2026 蛋白質結晶學訓練課程 (8 月 31 日至 9 月 4 日)
- 2026 年薄膜 X 光散射訓練課程 (9 月 1 日至 3 日)
- 2026 小分子單晶結晶學暑期學校 (9 月 8 日至 9 日)
- 2026 台灣創新技術博覽會 (未來科技館) (9 月 17 日至 19 日)
- 2026 國際材料研究學會亞洲會議暨中國材料科學學會年會之同步輻射論壇 (10 月 31 日至 11 月 5 日)
- NSRRC Open House (11 月 7 日)
- 2026 台灣化學工程學會年會之同步輻射論壇 (12 月 5 日至 6 日)

※ 上述資訊僅供參考，請以網頁正式公告為主。