



สถาบันวิจัยแสงซินโครตรอน (องค์การมหาชน)
Synchrotron Light Research Institute (Public Organization)
เอกสารความรู้ (knowledge documents)

ประเภทเอกสาร

- TR: รายงานเชิงเทคนิค (TECHNICAL REPORT)
 TN: รายงานเชิงเทคนิค (ฉบับย่อ) (TECHNICAL NOTE)
 MN: คู่มือการดำเนินงาน (Operation Manual) / คู่มือการใช้งาน (Instruction Manual) /
แผนปฏิบัติการ (Operation Plan)

หมายเลขเอกสาร(For QDS) KM Document No.	SLRI-TR-2026-083
ชื่อเรื่อง Title	ผลของ Peaking Time ต่อคุณภาพสัญญาณในระบบ XAS ที่ใช้ 4-CH SDD
ชื่อฝ่าย Department	ฝ่ายวิจัยและประยุกต์ใช้แสงซินโครตรอน
วันที่เผยแพร่ Release date	22 มกราคม 2569
ระดับการเปิดเผยข้อมูล Level of Disclosure	<input type="checkbox"/> ข้อมูลในรายงานเป็นความลับ (Undisclosed)
	<input type="checkbox"/> เปิดเผยข้อมูลเฉพาะภายในฝ่ายหรือส่วนงาน (Information can be disclosed within department/section)
	<input type="checkbox"/> เปิดเผยข้อมูลได้สำหรับพนักงานของสถาบันฯ และอนุญาตให้บันทึกข้อมูลเข้าเป็นส่วนหนึ่งของระบบ Knowledge Management ภายในสถาบันฯ (Information can be disclosed for SLRI staffs and can be part of SLRI's Knowledge Management System)
	<input checked="" type="checkbox"/> เปิดเผยข้อมูลได้เพื่อเป็นองค์ความรู้สาธารณะ เช่นเว็บไซต์ของสถาบันฯ (Information is available for public)
คำสำคัญ Keyword	Peaking Time, SDD, Dead Time, Energy Shift

รายชื่อผู้จัดทำรายงานหรือผู้ดำเนินโครงการ (Name)	ส่วนร่วมในการปฏิบัติงานในโครงการ Responsible tasks in the project
ดร.จินตหรา ปัดชาสี	วางแผน ควบคุม ตรวจสอบการผลการทดสอบ และเขียน รายงานผลการทดลอง
ดร.พินิจ กิจขุนทด	วางแผน และตรวจสอบการผลการทดสอบ
ดร.วันวิสา ลิ้มพิรัตน์	วางแผน และตรวจสอบการผลการทดสอบ
ดร.วุฒิไกร บุชยาพร	วางแผน และตรวจสอบการผลการทดสอบ
นายสมบุญทรัพย์ รอดพร	วางแผนการทดลอง เตรียมอุปกรณ์และปฏิบัติการทดลอง
นายภาสวัฒน์ ไพศาล	วางแผนการทดลอง เตรียมอุปกรณ์และปฏิบัติการทดลอง

บทคัดย่อ

รายงานเชิงเทคนิคฉบับนี้ศึกษาผลของการปรับค่า Peaking Time ต่อคุณภาพการตรวจวัดด้วยเทคนิค X-ray Absorption Spectroscopy (XAS) ในโหมดฟลูออเรสเซนซ์ โดยใช้ 4-channel Silicon Drift Detector (SDD) ยี่ห้อ Vortex รุ่น ME4-PS เป็นตัวตรวจจับหลัก การทดลองดำเนินการโดยปรับค่า Peaking Time จำนวน 3 ค่า ได้แก่ 0.26, 1.00 และ 2.00 μs และใช้ Mn foil เป็นตัวอย่างอ้างอิงในการประเมินความถูกต้องของตำแหน่งพลังงานและความเสถียรของสเปกตรัม

ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่า Peaking Time มีผลอย่างมากต่อคุณภาพของสัญญาณฟลูออเรสเซนซ์ ทั้งในด้านความละเอียดพลังงาน ระดับสัญญาณรบกวน (noise) อัตราการนับ (count) และ dead time ของระบบ โดยพบว่า Peaking Time ที่สั้นเกินไปทำให้การขึ้นรูปสัญญาณพัลส์ไม่สมบูรณ์ ส่งผลให้เกิด noise สูงและการเลื่อนตำแหน่งพลังงานของ Mn K-edge ขณะที่ Peaking Time ที่ยาวเกินไปแม้จะช่วยลด noise แต่ทำให้ dead time เพิ่มขึ้นและจำกัดความสามารถในการรองรับอัตราการนับสูง นอกจากนี้ ได้ทำการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการนับที่ตรวจวัดได้และความเข้มขาเข้าโดยใช้ แบบจำลอง paralyzable dead-time model ตามทฤษฎี Woicik เพื่อประเมิน throughput และช่วงการทำงานที่เหมาะสมของระบบ ผลการวิเคราะห์แสดงให้เห็นว่า ค่า dead-time parameter เพิ่มขึ้นเมื่อ Peaking Time เพิ่มขึ้น ส่งผลให้ maximum throughput ลดลงตามลำดับ และสามารถปรับแบบจำลองดังกล่าวกำหนด safe operating regime เพื่อหลีกเลี่ยงความไม่เชิงเส้นและปัญหา energy shift ได้อย่างมีประสิทธิภาพ

จากผลการศึกษาโดยรวม พบว่า Peaking Time = 1.00 μs เป็นค่าที่เหมาะสมที่สุดภายใต้เงื่อนไขการทดลองนี้ เนื่องจากให้ความสมดุลระหว่างอัตราการนับ dead time และความถูกต้องของตำแหน่งพลังงานของสัญญาณ ทำให้ข้อมูล XAS มีความเสถียรและเชื่อถือได้ เหมาะกับการใช้งานที่ต้องการความแม่นยำเชิงพลังงานสูง โดยเฉพาะการวิเคราะห์ XANES

คำสำคัญ: Peaking Time, SDD, Dead Time, Energy Shift

1. บทนำ

เทคนิค X-ray Absorption Spectroscopy (XAS) เป็นวิธีการวิเคราะห์โครงสร้างระดับอะตอมและสถานะแวดล้อมทางเคมีของวัสดุที่ได้รับความนิยมอย่างแพร่หลาย เนื่องจากสามารถให้ข้อมูลเชิงลึกเกี่ยวกับสถานะออกซิเดชัน ระยะระหว่างอะตอม และโครงสร้างเฉพาะ (local structure) ของธาตุเป้าหมายได้อย่างมีประสิทธิภาพ โดยเฉพาะการวิเคราะห์ในช่วง XANES และ EXAFS ซึ่งมีบทบาทสำคัญในการศึกษาวัสดุเชิงฟังก์ชัน วัสดุพลังงาน และวัสดุเชิงโครงสร้าง ในกรณีของการตรวจวัดในโหมดฟลูออเรสเซนซ์ อุปกรณ์ตรวจวัดที่ถูกใช้อย่างแพร่หลายคือ Silicon Drift Detector (SDD) เนื่องจากมีความไวสูง ให้ความละเอียดพลังงานที่ดี และสามารถรองรับอัตราการนับสัญญาณที่ค่อนข้างสูงได้

อย่างไรก็ตาม ประสิทธิภาพของ SDD ไม่ได้ขึ้นอยู่กับตัวตรวจจับเพียงอย่างเดียว แต่ยังขึ้นกับการตั้งค่าพารามิเตอร์ทางอิเล็กทรอนิกส์หลายประการ โดยเฉพาะอย่างยิ่ง Peaking Time ซึ่งเป็นช่วงเวลาที่วงจร shaping amplifier ใช้ในการขึ้นรูปสัญญาณพัลส์จาก detector จนถึงค่าสูงสุดก่อนการประมวลผล Peaking Time มีบทบาทสำคัญต่อคุณภาพของสัญญาณที่ตรวจวัดได้ ทั้งในด้านความละเอียดพลังงาน (energy resolution) ระดับสัญญาณรบกวน (noise) อัตราการนับสัญญาณ (count rate) และการเกิด dead time ของระบบ หากตั้งค่า Peaking Time ไม่เหมาะสม อาจทำให้การขึ้นรูปสัญญาณไม่สมบูรณ์ เกิด noise สูง การสูญเสียสัญญาณจาก pulse pile-up หรือการเข้าสู่สภาวะไม่เชิงเส้น ส่งผลให้ข้อมูล XAS ที่ได้มีความคลาดเคลื่อนและลดความน่าเชื่อถือในการวิเคราะห์เชิงโครงสร้าง โดยเฉพาะในบริเวณ XANES และ EXAFS ที่ไวต่อความผิดพลาดเชิงพลังงาน

ดังนั้น การศึกษาผลกระทบของการตั้งค่า Peaking Time จึงมีความสำคัญอย่างยิ่งต่อการเพิ่มประสิทธิภาพและความถูกต้องของการตรวจวัดด้วยเทคนิค XAS รายงานเชิงเทคนิคฉบับนี้มุ่งประเมินผลของการปรับค่า Peaking Time ได้แก่ 0.26 1.00 และ 2.00 ไมโครวินาที ต่อคุณภาพของสัญญาณฟลูออเรสเซนซ์ที่ตรวจวัดได้ด้วย SDD โดยพิจารณาทั้งในด้านอัตราการนับ ความละเอียดพลังงาน ความเสถียรของข้อมูล และความเหมาะสมต่อการใช้งานจริง ผลการศึกษานี้คาดว่าจะสามารถใช้เป็นแนวทางในการกำหนดค่า Peaking Time ที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการตรวจวัด XAS ด้วย SDD ภายใต้สภาวะการทดลองที่เกี่ยวข้อง และช่วยลดความคลาดเคลื่อนของข้อมูลในการวิเคราะห์เชิงโครงสร้างในอนาคต

2. วัตถุประสงค์

2.1 เพื่อศึกษาผลของการปรับค่า Peaking Time ที่ 0.26 1.00 และ 2.00 μs ต่อคุณภาพสัญญาณฟลูออเรสเซนซ์ในระบบ XAS

2.2 เพื่อระบุค่า Peaking Time ที่เหมาะสมที่สุดสำหรับระบบ 4-channel SDD โดยพิจารณาจากข้อจำกัดด้านอัตราการนับ (count rate) dead time และช่วงการทำงานเชิงเส้นของ detector เพื่อให้ได้ข้อมูล XAS ที่มีความถูกต้องและเชื่อถือได้

3. แนวคิด/ทฤษฎี/หลักการ

3.1 หลักการของ X-ray Absorption Spectroscopy (XAS)

เทคนิค X-ray Absorption Spectroscopy (XAS) เป็นวิธีวิเคราะห์เชิงโครงสร้างระดับอะตอมที่ใช้ศึกษาสถานะออกซิเดชัน โครงสร้างเฉพาะ (local structure) และสภาพแวดล้อมทางเคมีรอบอะตอมของธาตุเป้าหมาย โดยอาศัยการวัดการดูดกลืนรังสีเอกซ์ของตัวอย่างเมื่อพลังงานของลำแสงถูกปรับเพิ่มขึ้นอย่างต่อเนื่องผ่านบริเวณขอบดูดกลืน (absorption edge) ของธาตุนั้น ๆ เมื่อพลังงานของรังสีเอกซ์มากพอที่จะกระตุ้นอิเล็กตรอนชั้นในให้หลุดออกจากอะตอม สเปกตรัมจะปรากฏโครงสร้างละเอียดซึ่งสะท้อนข้อมูลเชิงเคมีและโครงสร้างของระบบได้อย่างมีประสิทธิภาพ โดยสเปกตรัมจะปรากฏลักษณะเด่นบริเวณขอบดูดกลืนดังรูปที่ 1 ซึ่งแบ่งออกเป็น 2 ช่วงได้แก่

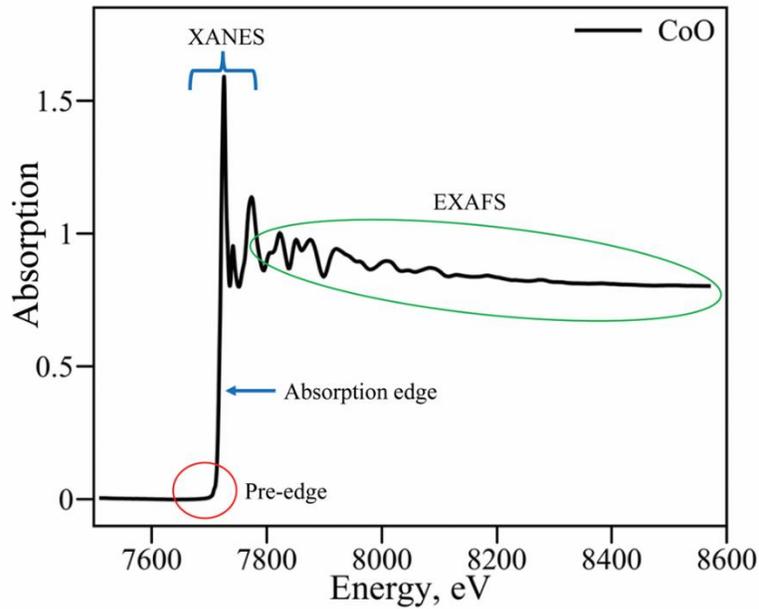
ก. XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) ซึ่งอยู่ใกล้บริเวณขอบดูดกลืนและไวต่อสถานะอิเล็กตรอนนิกซ์ของอะตอม เช่น

- ให้ข้อมูลเกี่ยวกับสถานะออกซิเดชัน (oxidation state)
- รูปทรงเรขาคณิตของสภาพแวดล้อมอะตอม (local geometry/symmetry)
- ลักษณะโครงสร้างแถบพลังงานและการกระจายสถานะอิเล็กตรอนนิกซ์เฉพาะที่ (local electronic structure)

ข. EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) ซึ่งอยู่ในช่วงพลังงานสูงกว่าขอบดูดกลืนและเกิดจากการแทรกสอดของคลื่นอิเล็กตรอน ทำให้สามารถสกัดข้อมูลเชิงโครงสร้างได้ เช่น

- ให้ข้อมูลเกี่ยวกับระยะระหว่างอะตอม (interatomic distance)
- จำนวนอะตอมรอบข้าง (coordination number)
- ความไม่เป็นระเบียบเชิงโครงสร้าง (structural/thermal disorder)

คุณภาพของข้อมูล XAS โดยเฉพาะในโหมดฟลูออเรสเซนซ์ขึ้นอยู่กับความเสถียรของลำแสงและประสิทธิภาพของระบบตรวจวัดอย่างมีนัยสำคัญ เนื่องจากสัญญาณฟลูออเรสเซนซ์มีความเข้มต่ำเมื่อเทียบกับสัญญาณพื้นหลัง จึงจำเป็นต้องใช้ตัวตรวจจับที่มีความไวสูงและมีความละเอียดพลังงานดี เช่น Silicon Drift Detector (SDD)



รูปที่ 1 ตัวอย่างสเปกตรัม XAS

3.2 หลักการทำงานของ Silicon Drift Detector (SDD)

Silicon Drift Detector (SDD) เป็นตัวตรวจจับสนิวเคลียร์ชนิดเซมิคอนดักเตอร์ที่นิยมใช้ในการวัดสัญญาณฟลูออเรสเซนซ์ เนื่องจากมีความไวสูง ให้ความละเอียดพลังงานดี และรองรับอัตราการนับได้สูงในเชิงปฏิบัติ โครงสร้างของ SDD ถูกออกแบบให้มี anode ขนาดเล็ก ทำให้ค่าความจุไฟฟ้า (capacitance) ต่ำ ส่งผลให้สัญญาณรบกวนทางอิเล็กทรอนิกส์ลดลงเมื่อเทียบกับตัวตรวจจับสนิวเคลียร์แบบ SiPIN (Amptek, 2018) โดยกระบวนการทำงานของ SDD สามารถอธิบายได้เป็น 3 ขั้นตอนหลัก ดังนี้

1. การสร้างประจุ (Charge Generation) เมื่อโฟตอนรังสีเอกซ์ตกกระทบซิลิคอน จะเกิดการสร้างคู่ประจุอิเล็กตรอน-โฮลจำนวนหนึ่ง ซึ่งจำนวนประจุมีความสัมพันธ์เชิงเส้นกับพลังงานของโฟตอน ทำให้สามารถใช้ความสูงของสัญญาณพัลส์เป็นตัวแทนของพลังงานได้ (Knoll, 2010)

2. การเคลื่อนที่ของประจุ (Charge Drift) สนามไฟฟ้าภายใน detector ทำให้อิเล็กตรอน drift ไปยัง anode อย่างมีประสิทธิภาพ กระบวนการนี้ช่วยให้สัญญาณมีความเสถียรและลดผลกระทบจาก noise

3. การขยายและขึ้นรูปสัญญาณ (Pulse Amplification & Shaping) สัญญาณที่ได้จาก detector จะถูกส่งผ่าน preamplifier เพื่อขยายสัญญาณ และผ่าน shaping amplifier เพื่อปรับรูปคลื่นสัญญาณให้เหมาะสมต่อการวัดพลังงานและการแยกเหตุการณ์ (event separation) ซึ่งพารามิเตอร์สำคัญของขั้นตอนนี้คือ Peaking Time

3.3 บทบาทของ Peaking Time

Peaking Time คือช่วงเวลาที่ยังคง shaping amplifier ใช้ในการขึ้นรูปสัญญาณพัลส์จาก detector จนถึงค่าสูงสุด ก่อนที่ระบบจะทำการวัดความสูงพัลส์เพื่อแปลงเป็นพลังงานของโฟตอน (XIA LLC, 2017) การเลือกค่า Peaking Time มีผลโดยตรงต่อคุณสมบัติสำคัญของระบบตรวจวัดสัญญาณ ดังนี้

1. ความละเอียดพลังงาน (Energy Resolution) Peaking Time ที่มากขึ้นทำให้การกรองสัญญาณรบกวนความถี่สูงมีประสิทธิภาพขึ้น ส่งผลให้พัลส์มีความนิ่งและค่าความสูงพัลส์แปรปรวนน้อยลง จึงมักทำให้ความละเอียดพลังงานดีขึ้น อย่างไรก็ตาม หาก Peaking Time ยาวเกินไปจะทำให้พัลส์กว้างและเพิ่มโอกาสการซ้อนทับของพัลส์ในสภาวะอัตราการนับสูง (Knoll, 2010)

2. สัญญาณรบกวนทางอิเล็กทรอนิกส์ (Electronic Noise) Noise ในระบบเกิดจากหลายแหล่ง เช่น thermal noise, shot noise และ noise จากวงจร preamplifier การเพิ่ม Peaking Time ช่วยให้วงจร shaping มีเวลาในการกรอง noise ได้มากขึ้น จึงมีกนระดับ noise และทำให้ baseline เรียบขึ้น อย่างไรก็ตามต้องแลกกับความเร็วในการประมวลผลที่ลดลง (Amptek, 2018)

3. Count Rate & Dead Time Peaking Time ส่งผลต่อความเร็วการประมวลผลของระบบอย่างชัดเจน โดย

Peaking Time สั้น → ระบบรับสัญญาณได้เร็ว → รองรับ count rate สูงขึ้น แต่ noise และความไม่สมบูรณ์ของ pulse shaping อาจเพิ่มขึ้น

Peaking Time ยาว → pulse shaping สมบูรณ์ขึ้นและ noise ลดลง แต่พัลส์กว้างขึ้น → dead time เพิ่มขึ้น และ count rate ที่ตรวจวัดได้ลดลง

4. Pulse pile-up และความไม่เชิงเส้นของระบบ (Pile-up & Nonlinearity) เมื่ออัตราการนับสูงเหตุการณ์โฟตอนอาจเกิดถึงจนพัลส์ถัดไปเข้ามาก่อนที่พัลส์ก่อนหน้าจะกลับสู่ baseline ทำให้เกิด pulse pile-up ซึ่งอาจทำให้ระบบอ่านค่าความสูงพัลส์ผิดเพี้ยน เกิดการนับผิดและทำให้ความสัมพันธ์ระหว่าง OCR กับความเข้มข้นเข้าไม่เป็นเชิงเส้น (nonlinearity) ผลกระทบดังกล่าวมีความสำคัญมากต่อการวัด XANES ที่ไวต่อการเลื่อนตำแหน่งพลังงานของขอบดูดกลืน (energy shift)

5. ความเสถียรของสเปกตรัม XAS Peaking Time ที่เหมาะสมช่วยให้ baseline เรียบ ลดการบิดเบี้ยวของ near-edge structure และเพิ่มความเที่ยงตรงของ EXAFS amplitude และ phase ซึ่งสำคัญต่อการตีโครงสร้างในขั้นตอนวิเคราะห์ (Newville, 2015)

3.4 ความสำคัญของ Peaking Time ต่อคุณภาพการวัด XAS ด้วย SDD

Peaking Time เป็นตัวกำหนดความสมดุลของคุณภาพสัญญาณและความเร็วของระบบตรวจวัด โดยมีผลต่อคุณภาพข้อมูล XAS ในประเด็นสำคัญ ได้แก่

- ความคมชัดของ XANES (edge sharpness) และความเรียบของ baseline
- ความแม่นยำของ EXAFS (amplitude และ phase)
- ความสามารถในการแยกพีคพลังงาน (peak separation) เพื่อแยกสัญญาณฟลูออเรสเซนซ์ออกจากพื้นหลัง
- ความถูกต้องของการกำหนดตำแหน่งพลังงาน (edge position) ซึ่งสัมพันธ์กับการระบุสถานะออกซิเดชัน

หากตั้งค่า Peaking Time ไม่เหมาะสม อาจนำไปสู่การขึ้นรูปพัลส์ไม่สมบูรณ์ (incomplete pulse shaping) การเพิ่มของ noise การเพิ่ม dead time และการเกิด pulse pile-up ซึ่งทำให้สเปกตรัมผิดรูปและลดความน่าเชื่อถือของการวิเคราะห์ XANES/EXAFS ดังนั้นการหาค่า Peaking Time ที่เหมาะสมภายใต้เงื่อนไขการทดลองจริงจึงเป็นขั้นตอนสำคัญของการตั้งค่าระบบ XAS ที่ใช้ SDD

3.5 การเลือกค่า Peaking Time ที่ใช้ในการศึกษา

การศึกษานี้ทดสอบค่า Peaking Time 3 ค่า ได้แก่ 0.26, 1.00 และ 2.00 μs ซึ่งครอบคลุมช่วงค่าที่ใช้จริงในการปรับระบบ SDD และช่วยให้เห็นแนวโน้มของการแลกเปลี่ยน (trade-off) ระหว่างความเร็วและคุณภาพสัญญาณได้อย่างชัดเจน กล่าวคือค่า 0.26 μs แทนสถานะ shaping เร็วมากเพื่อรองรับอัตราการนับสูง ค่า 1.00 μs เป็นค่ากลางที่มักให้สมดุลระหว่าง resolution และ count rate ส่วนค่า 2.00 μs เป็นสถานะ shaping ยาวเพื่อเน้นลด noise และเพิ่มความสมบูรณ์ของ pulse shaping แต่มีแนวโน้มเพิ่ม dead time และลดอัตราการนับที่ตรวจวัดได้

ตารางที่ 1 การทดสอบพารามิเตอร์ peaking time

Peaking Time	ความหมาย	การคาดการณ์ตามทฤษฎี
0.26 μs	shaping เร็วมาก	noise สูง, resolution ต่ำ แต่ count rate สูง
1.00 μs	ค่ากลางที่ใช้กันมากที่สุด	resolution ดี, noise ต่ำ, count rate เหมาะสม
2.00 μs	shaping นาน	noise ต่ำมาก แต่เกิด dead time และ count rate ลดลง

ดังนั้น การเลือกค่าทั้ง 3 ช่วงทำให้สามารถประเมินจุดสมดุลระหว่างคุณภาพสเปกตรัมและความสามารถในการรองรับอัตราการนับได้อย่างครบถ้วน และสามารถนำไปใช้กำหนดค่า Peaking Time ที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการวัด XAS ด้วย SDD ภายใต้เงื่อนไขการทดลองนี้

4. วิธีการดำเนินงาน

4.1 อุปกรณ์และเครื่องมือที่ใช้ (Instruments and Equipment) การทดลองนี้ดำเนินการโดยใช้อุปกรณ์และเครื่องมือดังต่อไปนี้

4.1.1 ระบบ X-ray Absorption Spectroscopy (XAS) ณ ระบบลำแสง 5.2 สถาบันวิจัยแสงซินโครตรอน พร้อมมอโนโครเมเตอร์ที่สามารถปรับพลังงานรังสีเอกซ์ได้อย่างต่อเนื่อง

4.1.2 Silicon Drift Detector (SDD) สำหรับตรวจวัดสัญญาณฟลูออเรสเซนซ์

4.1.3 โปรแกรม xManager สำหรับตั้งค่าพารามิเตอร์ของ SDD ตรวจสอบ waveform, noise, energy resolution และปรับค่า peaking time

4.1.4 ระบบ Multi-channel Analyzer (MCA) ที่รวมอยู่ในโปรแกรม xManager

4.1.5 โลหะ Mn ใช้เป็นสารมาตรฐานสำหรับการทดสอบและตรวจสอบความถูกต้องของตำแหน่งพลังงาน

4.2 การตั้งค่าการทดลองใน xManager (Detector Configuration)

ก่อนเริ่มการทดลอง ได้ทำการตั้งค่าระบบตรวจวัดโดยใช้โปรแกรม xManager ตามขั้นตอนดังนี้

4.2.1 เปิดโปรแกรม xManager และเชื่อมต่อกับระบบ SDD

4.2.2 ตรวจสอบสถานะของ detector ได้แก่ gain และสถานะการทำงานของ preamplifier

4.2.3 ตั้งค่า Peaking Time ตามค่าที่ต้องการศึกษา ได้แก่ 0.26 1.00 และ 2.00 μs

4.2.4 ตรวจสอบค่า Baseline, Noise, Dead Time และ Count Rate บนหน้าต่าง Monitor ของโปรแกรม xManager

4.2.5 บันทึกสัญญาณ waveform เพื่อประเมินความสมบูรณ์ของการขึ้นรูปพัลส์ (pulse shaping)

4.3 ขั้นตอนการทดลอง (Experimental Procedure)

4.3.1 การเตรียมระบบ

ก. เปิดระบบ XAS และระบบตรวจวัด SDD

ข. ตรวจสอบค่า baseline noise และ dead time ของ SDD ก่อนเริ่มการทดลอง

ค. ปรับตำแหน่งตัวอย่าง Mn foil ให้อยู่ในแนวเส้นทางลำแสงรังสีเอกซ์ (beam path)

4.3.2 การเก็บข้อมูลสำหรับแต่ละ peaking time ดำเนินการตามขั้นตอนดังนี้

ก. ตั้งค่า Peaking Time และ Trigger Time ของระบบประมวลผลสัญญาณ โดยกำหนดให้ Trigger Time คงที่ตลอดการทดลอง

ข. ทำการสแกนสัญญาณ XRF ด้วยโปรแกรม xManager โดยปรับค่าความเข้มขาเข้า (real I0) ในช่วง 5,000-170,000 a.u.

ค. บันทึกข้อมูลสเปกตรัม พร้อมพารามิเตอร์สำคัญ ได้แก่ observed count rate (counts/s) และ dead time (%)

4.4 การวิเคราะห์ dead time และ throughput ด้วยแบบจำลอง Paralyzable (Woicik approach)

ในการประเมินข้อจำกัดของระบบ Silicon Drift Detector (SDD) ภายใต้สภาวะอัตราการนับสูง โดยการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มขาเข้า (real I0) และอัตราการนับที่ตรวจวัดได้ (Observed Count Rate; OCR) โดยใช้แบบจำลอง dead time แบบ Paralyzable ซึ่งสามารถอธิบายพฤติกรรมความไม่เชิงเส้นของ detector เมื่ออัตราการนับเพิ่มสูงขึ้นจนเกิด pulse pile-up และ dead time ของระบบอิเล็กทรอนิกส์ สมการที่ใช้มีรูปแบบดังนี้

$$OCR = PI_0 e^{-PI_0 \tau_d} \quad (1)$$

โดยที่ I_0 คือ ความเข้มขาเข้า (real I0, a.u.)

OCR คือ อัตราการนับที่ตรวจวัดได้จากโปรแกรม xManager (counts/s)

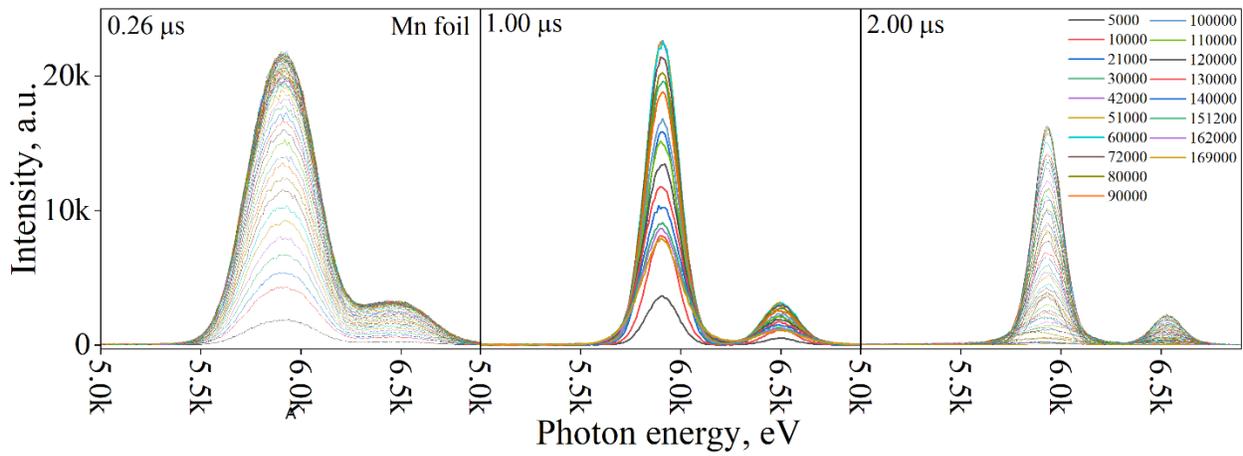
P คือ ค่าคงที่สำหรับแปลง I_0 เป็นอัตราการนับขาเข้าจริง $ICR_t = PI_0$

τ_d คือ พารามิเตอร์ dead-time ของระบบ (วินาที)

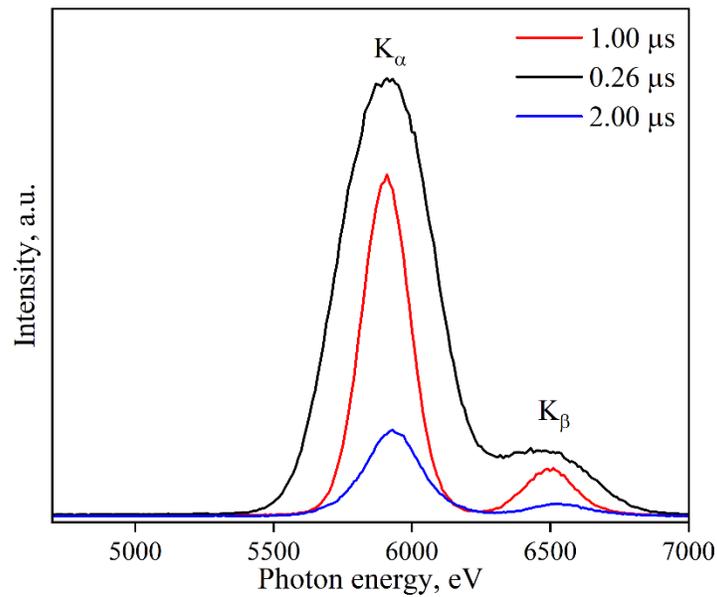
การฟิตข้อมูลดำเนินการด้วยโปรแกรม Origin โดยใช้ nonlinear curve fitting (user-defined function) แยกฟิตสำหรับแต่ละค่า Peaking Time ได้แก่ 0.26, 1.00 และ 2.00 μ s เพื่อเปรียบเทียบผลของพารามิเตอร์ต่อ throughput และช่วงการทำงานที่เหมาะสมของระบบตรวจวัด

5. ผลการทดลองและอภิปรายผล

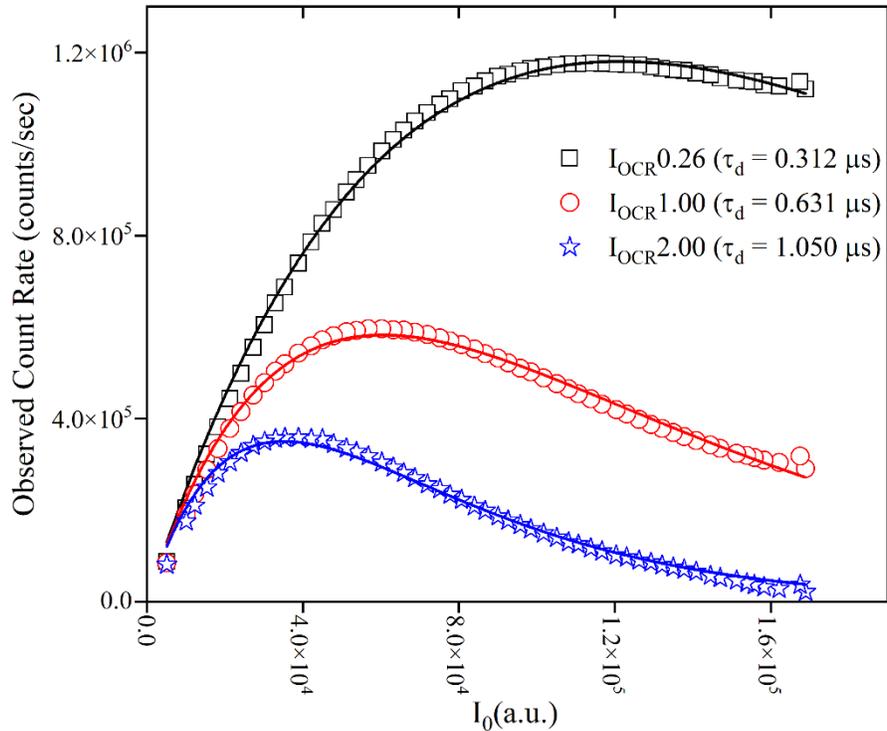
5.1 ผลการทดลองและการเปรียบเทียบผลการวัด



รูปที่ 2 สเปกตรัม XRF ของโลหะ Mn ที่ตรวจวัดด้วย SDD สำหรับค่า Peaking Time ต่างกัน (0.26, 1.00 และ 2.00 μs)



รูปที่ 3 เปรียบเทียบ XRF ของสารมาตรฐานโลหะ Mn ระหว่าง peaking time ที่ 0.26 1.00 และ 2.00 μs



รูปที่ 4 ความสัมพันธ์ระหว่าง OCR และ I_0 สำหรับ Peaking Time 0.26, 1.00 และ 2.00 μs พร้อมเส้นฟิตด้วยแบบจำลอง Paralyzable เพื่อหาค่า P และ τ_d ของระบบ

จากการทดลองปรับค่า Peaking Time ที่ 0.26, 1.00 และ 2.00 μs ในระบบ XAS ที่ใช้ SDD และตรวจวัดสัญญาณในโหมดฟลูออเรสเซนซ์ ดังแสดงในรูปที่ 2 พบว่าการเปลี่ยนค่า Peaking Time ส่งผลต่อคุณภาพของสัญญาณอย่างชัดเจน ทั้งในด้านรูปร่างของสเปกตรัม XRF ความคมชัดของ absorption edge ความเรียบของ baseline ความละเอียดพลังงาน ระดับสัญญาณรบกวน อัตราการนับ (count rate) และ dead time ของระบบ นอกจากนี้ยังพบว่า Peaking Time มีผลโดยตรงต่อการเลื่อนตำแหน่งพลังงานของสัญญาณ (energy shift) โดยเฉพาะเมื่อใช้ Mn foil เป็นตัวอย่างอ้างอิง ซึ่งเป็นวัสดุที่มีตำแหน่ง absorption edge คมชัดและเหมาะสมสำหรับการตรวจสอบความถูกต้องของการจัดตำแหน่งพลังงานของระบบ

รูปที่ 3 แสดงสเปกตรัม XRF ของ Mn foil ที่ได้จากการตั้งค่า Peaking Time ต่างกัน พบว่าสเปกตรัมมีการเปลี่ยนแปลงทั้งในด้านตำแหน่งพลังงานและรูปร่างของพีคอย่างชัดเจน ขณะที่รูปที่ 4 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการนับที่ตรวจวัดได้ (Observed Count Rate; OCR) และความเข้มขาเข้า (real I_0) สำหรับแต่ละค่า Peaking Time พร้อมเส้นฟิตด้วยแบบจำลอง paralyzable dead-time model เพื่อหาค่าพารามิเตอร์ P และ τ_d ของระบบ

ตารางที่ 2 การทดสอบพารามิเตอร์ peaking time ที่ได้จากการฟิตด้วยแบบจำลอง Paralyzable

Peaking Time, μs	P	τ_d, s	$\tau_d, \mu\text{s}$	R^2	OCR_m, cps	$I_0, \text{a.u.}$
0.26	26.44	3.116×10^{-7}	0.312	0.996	1.187×10^6	3.142×10^4
1.00	26.15	6.314×10^{-7}	0.631	0.986	5.860×10^5	1.568×10^4
2.00	27.00	1.050×10^{-6}	1.050	0.989	3.521×10^5	9.121×10^3

หมายเหตุ: $OCR_m = \frac{0.37}{\tau_d}$ และ $I_0 = \frac{0.7OCR_m}{P}$

5.2 ผลเชิงพลังงานและผลของ Peaking Time

เมื่อพิจารณาผลการวัด Mn foil ที่ Peaking Time = 0.26 μs พบว่าตำแหน่งของ Mn K-edge มีการเลื่อนออกจากตำแหน่งอ้างอิงอย่างชัดเจนโดยสเปกตรัมแสดงลักษณะ edge ที่ไม่คมและมีการบิดเบี้ยวของรูปทรงใกล้เคียงบริเวณขอบคูดกลืน ซึ่งเกิดจากการที่ pulse shaping ยังไม่สมบูรณ์ ทำให้ระบบอ่านค่าความสูงของพีคส์ที่ไม่สอดคล้องกับพลังงานจริงของโฟตอน ส่งผลให้เกิด systematic energy shift ซึ่งไม่สามารถแก้ไขได้ด้วยการ normalize สเปกตรัมเพียงอย่างเดียว

ในกรณีของ Peaking Time = 1.00 μs พบว่าตำแหน่งของ Mn K-edge มีความสอดคล้องกับค่ามาตรฐานมากที่สุด รูปทรงของ XRF มีความคมชัดและเสถียร แสดงให้เห็นว่า Peaking Time ในช่วงนี้ช่วยให้ pulse shaping สมบูรณ์เพียงพอสำหรับการอ่านค่าพลังงานอย่างถูกต้อง ทำให้การจัดตำแหน่งพลังงานของระบบมีความแม่นยำสูง เหมาะสมสำหรับการใช้ Mn foil เป็น reference ในการ calibrate พลังงานของระบบ XAS

สำหรับ Peaking Time = 2.00 μs แม้ว่าสเปกตรัมจะมี baseline ที่เรียบและระดับ noise ต่ำ แต่พบว่าตำแหน่งของ Mn K-edge มีแนวโน้มเกิดการเลื่อนเล็กน้อยในบางสภาวะการวัด ซึ่งอาจเกิดจากผลของ dead time ที่เพิ่มขึ้นและการสูญเสียโฟตอนบางส่วนในช่วงที่อัตราการนับสูง แม้การเลื่อนดังกล่าวจะมีขนาดเล็กกว่ากรณี Peaking Time = 0.26 μs อย่างชัดเจน แต่ยังคงสะท้อนว่าการตั้งค่า Peaking Time ที่ยาวเกินไปอาจส่งผลกระทบต่อความเที่ยงตรงของการกำหนดตำแหน่งพลังงานในเชิงปฏิบัติ

5.3 ผลจากแบบจำลอง Paralyzable (Woicik approach)

เพื่อประเมินข้อจำกัดของระบบตรวจวัดภายใต้สภาวะอัตราการนับสูง ได้ทำการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มขาเข้า (real I_0) และอัตราการนับที่ตรวจวัดได้ (Observed Count Rate; OCR) โดยใช้แบบจำลอง paralyzable dead-time model ตามแนวทางของ Woicik ซึ่งเหมาะสมสำหรับอธิบายพฤติกรรมของระบบตรวจวัดที่ได้รับผลกระทบจาก dead time และ pulse pile-up เมื่ออัตราการนับเพิ่มสูงขึ้น

จากผลการฟิตข้อมูลด้วยสมการ (1) พบว่าค่า dead-time parameter (τ_d) เพิ่มขึ้นอย่างเป็นระบบเมื่อค่า Peaking Time เพิ่มขึ้น โดยมีค่าเท่ากับ 0.312, 0.631 และ 1.050 μs สำหรับ Peaking Time 0.26, 1.00 และ 2.00 μs ตามลำดับ แนวโน้มดังกล่าวสะท้อนว่าระบบต้องใช้เวลาในการประมวลผลสัญญาณต่อเหตุการณ์หนึ่งครั้งนานขึ้นเมื่อใช้ Peaking Time ที่ยาวขึ้น ส่งผลให้ความสามารถในการรองรับอัตราการนับสูงสุดของระบบลดลง

เมื่อคำนวณ maximum throughput จากความสัมพันธ์ $OCR_m = \frac{0.37}{\tau_d}$ พบว่า ลดลงตามลำดับจากประมาณ 1.190 Mcps \rightarrow 0.586 Mcps \rightarrow 0.352 Mcps เมื่อ Peaking Time เพิ่มจาก 0.26 เป็น 1.00 และ 2.00 μs ตามลำดับ แสดงให้เห็นว่าแม้การเพิ่ม Peaking Time จะช่วยให้การขึ้นรูปสัญญาณมีความสมบูรณ์มาก

ขึ้นในเชิงคุณภาพ แต่ต้องแลกกับการลดลงของ throughput และช่วงการทำงานที่ยังคงความเป็นเชิงเส้นของระบบ เพื่อกำหนดช่วงการทำงานที่เหมาะสมในเชิงปฏิบัติ ได้ใช้เกณฑ์ safe operating regime โดยจำกัดอัตราการนับขาเข้าจริงให้เป็นไปตามเงื่อนไข

$$ICR_t = PI_0 \leq 0.7OCR_m \quad (2)$$

ซึ่งให้ค่าขีดจำกัดของ real I_0 ประมาณ 3.1×10^4 , 1.6×10^4 และ 9.0×10^3 a.u. สำหรับ Peaking Time 0.26, 1.00 และ 2.00 μ s ตามลำดับ ผลดังกล่าวบ่งชี้ว่าเมื่อใช้ Peaking Time ที่ยาวขึ้น จำเป็นต้องควบคุมความเข้มขาเข้าให้อยู่ในช่วงที่ต่ำลง เพื่อหลีกเลี่ยงความไม่เชิงเส้นของระบบตรวจวัด

เมื่อพิจารณาผลการพิตร่วมกับการวัด Mn foil พบว่าการเลื่อนตำแหน่งพลังงานของ Mn K-edge ปรากฏชัดในสภาวะที่ real I_0 เข้าใกล้หรือเกินช่วงที่แบบจำลองคาดการณ์ว่าเป็นช่วงเหมาะสม ซึ่งสอดคล้องกับกลไกของ pulse pile-up และความคลาดเคลื่อนในการอ่านค่า pulse height ภายใต้สภาวะอัตราการนับสูง ส่งผลให้ตำแหน่งและรูปร่างของ XRF เกิดการบิดเบี้ยว

ดังนั้น ผลจากแบบจำลอง paralyzable dead-time model ตามแนว Woicik ไม่เพียงช่วยอธิบายพฤติกรรมของ count rate และ dead time ของระบบได้อย่างเป็นระบบเท่านั้น แต่ยังสามารถใช้เป็นเครื่องมือเชิงปฏิบัติในการกำหนดช่วงการทำงานที่เหมาะสมของ detector เพื่อลดความคลาดเคลื่อนเชิงพลังงานและเพิ่มความน่าเชื่อถือของข้อมูล XAS โดยเฉพาะสำหรับการวิเคราะห์ XANES ที่ต้องการความแม่นยำสูงในการกำหนดตำแหน่งพลังงานของ absorption edge

6. สรุปผล

รายงานเชิงเทคนิคฉบับนี้ได้ทำการศึกษาผลของการปรับค่า Peaking Time ต่อคุณภาพของการตรวจวัดด้วยเทคนิค XAS ในโหมดฟลูออเรสเซนซ์ โดยใช้ 4-channel SDD และใช้ Mn foil เป็นตัวอย่างอ้างอิงในการประเมินความถูกต้องของตำแหน่งพลังงานและเสถียรภาพของระบบ การทดลองดำเนินการโดยปรับค่า Peaking Time จำนวน 3 ค่า ได้แก่ 0.26, 1.00 และ 2.00 μ s และวิเคราะห์ผลทั้งเชิงสเปกตรัมและเชิงระบบ

จากผลการทดลองพบว่า การตั้งค่า Peaking Time มีผลโดยตรงต่อคุณภาพของสัญญาณฟลูออเรสเซนซ์ทั้งในด้านรูปร่างและความคมชัดของสเปกตรัม ความเรียบของ baseline ระดับสัญญาณรบกวน อัตราการนับ และ dead time ของระบบ โดยที่ Peaking Time ที่สั้นเกินไป (0.26 μ s) ทำให้ pulse shaping ไม่สมบูรณ์ ส่งผลให้เกิด noise สูงและการเลื่อนตำแหน่งพลังงานของ Mn K-edge อย่างชัดเจน ในขณะที่ Peaking Time ที่ยาวเกินไป (2.00 μ s) แม้จะช่วยลด noise และทำให้ baseline เรียบขึ้น แต่ทำให้ dead time เพิ่มขึ้นและลดความสามารถในการรองรับอัตราการนับสูง ส่งผลให้เกิดข้อจำกัดในการใช้งานเชิงปฏิบัติ

การวิเคราะห์ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการนับที่ตรวจวัดได้ (OCR) และความเข้มขาเข้า (real I_0) ด้วยแบบจำลอง paralyzable dead-time model ตามแนว Woicik แสดงให้เห็นว่า ค่า dead-time parameter (τ_d) เพิ่มขึ้นอย่างเป็นระบบเมื่อ Peaking Time เพิ่มขึ้น ส่งผลให้ maximum throughput (OCR_m) ลดลงตามลำดับ และทำให้ช่วงการทำงานที่ยังคงความเป็นเชิงเส้นของระบบแคบลง การกำหนดช่วงการทำงานที่เหมาะสมโดยอาศัยเกณฑ์ safe operating regime (สมการ 2) สามารถอธิบายและคาดการณ์สภาวะที่เกิดความไม่เชิงเส้นและ energy shift ของสัญญาณได้อย่างสอดคล้องกับผลการทดลอง

เมื่อพิจารณาผลการวัด Mn foil ร่วมกับผลการฟิต พบว่า Peaking Time = 1.00 μ s ให้ผลการตรวจวัดที่เหมาะสมที่สุดภายใต้เงื่อนไขการทดลองนี้ เนื่องจากให้ความสมดุลระหว่างความละเอียดพลังงาน อัตราการนับ และ dead time ของระบบ พร้อมทั้งลดการเกิด pulse pile-up และการเลื่อนตำแหน่งพลังงานของ Mn K-edge ทำให้ตำแหน่ง absorption edge มีความถูกต้องและเสถียร เหมาะสมสำหรับการใช้งาน XAS ที่ต้องการความแม่นยำเชิงพลังงานสูง โดยเฉพาะการวิเคราะห์ XANES ซึ่งอาศัยตำแหน่ง edge และรูปร่างของ near-edge structure เป็นข้อมูลสำคัญ

โดยสรุป ผลการศึกษานี้แสดงให้เห็นว่า การเลือกค่า Peaking Time ที่เหมาะสมเป็นปัจจัยสำคัญในการเพิ่มประสิทธิภาพของระบบ XAS ที่ใช้ SDD และการใช้แบบจำลอง paralyzable dead-time model สามารถเป็นเครื่องมือเชิงระบบที่มีประสิทธิภาพในการกำหนดช่วงการทำงานที่เหมาะสมของ detector ลดความคลาดเคลื่อนเชิงพลังงาน และเพิ่มความน่าเชื่อถือของข้อมูล XAS ทั้งในเชิงการทดลองและการวิเคราะห์โครงสร้างระดับอะตอม

7. กลุ่มผู้ใช้ประโยชน์

กลุ่มผู้ใช้ประโยชน์	ประโยชน์ที่ได้รับ
นักวิจัยด้าน XAS	ได้ข้อมูลสเปกตรัมที่มีความเสถียรและความละเอียดพลังงานดีขึ้น ทำให้การวิเคราะห์ XANES/EXAFS แม่นยำขึ้น
Beamline Scientists / Local contract	ใช้เป็นค่ามาตรฐานในการตั้งเครื่องมือ ลดเวลาในการปรับจูน และช่วยให้การให้คำแนะนำผู้ใช้งานถูกต้อง
นักศึกษาและผู้ใช้งานใหม่ของระบบ XAS	เรียนรู้หลักการตั้งค่า SDD ได้ง่าย ลดความเสี่ยงในการตั้งค่าผิดพลาด และสามารถทำการทดลองได้อย่างมีประสิทธิภาพ
วิศวกร/ช่างเทคนิค	ใช้ข้อมูลเพื่อออกแบบ ปรับแต่ง หรือบำรุงรักษาระบบตรวจวัด รวมถึงประเมินประสิทธิภาพ shaping time และ timing ของระบบ
ระบบลำเลียงแสง	ใช้เป็น SOP หรือมาตรฐานภายใน เพิ่มความสม่ำเสมอของข้อมูล ลดค่าใช้จ่ายจากการวัดซ้ำ และเพิ่มคุณภาพงานวิจัย

เอกสารอ้างอิง

- Amptek Inc., Silicon Drift Detector: Technical Overview, 2018.
- Bunker, G., Introduction to XAFS, Cambridge University Press, 2010.
- Knoll, G. F., Radiation Detection and Measurement, 4th Edition, Wiley, 2010.
- Newville, M., XAFS Analysis and Spectroscopy Methods, 2015.
- Sturm, J. M., & Klysubun, W., Performance of Silicon Drift Detectors for Fluorescence XAS, Journal of Synchrotron Radiation, 2012.
- XIA LLC., Pulse Processing Fundamentals for Silicon Detectors, Technical Note, 2017.
- Woicik, J.C., Ravel, B., Fischer, D.A. and Newburgh, W.J. (2010), Performance of a four-element Si drift detector for X-ray absorption fine-structure spectroscopy: resolution, maximum count rate, and dead-time correction with incorporation into the *ATHENA* data analysis software. J. Synchrotron Rad., 17: 409-413.