

EXAFS 数据采集系统

周荷琴

(中国科技大学)

介绍了一种以多丝正比室作探测器、由 IBM-PC 计算机构成的 EXAFS 谱仪数据采集及处理系统, 阐明了该系统的设计思想、硬件电路及编程方法, 数据采集程序完全由 BASIC 语言写成。

关键词: EXAFS 谱仪 数据采集 接口

一、EXAFS 谱仪简介

当 X 射线通过厚度为 x 的物质后, 强度由 I_0 衰减为 I , 即

$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

式中, μ 为物质的线吸收系数。一般情况下, μ 值随入射 X 射线能量增加而减小, 但在某些能量处, 由于原子内层电子被激发到外层, 引起 μ 值发生突变, 称为吸收边。在吸收边高能一侧, 吸收系数具有振荡现象, 从大约 30—50eV 以上直到 1000eV 范围内的振荡称为扩展的 X 射线吸收边精细结构 (Extended X-ray Absorption Fine Structure), 简称 EXAFS。

EXAFS 是由于邻近原子的作用引起的, 若对 EXAFS 数据作富里叶变换等处理, 便可得到原子间距和其它结构信息, 它被广泛地用来研究各种物质原子的邻近结构, 尤其适用于非晶态材料、催化剂及生物酶的研究。

图 1 为 EXAFS 谱仪框图。自 X 射线源发出的连续 X 光经弯晶单色仪聚焦后, 形成窄带单色 X 射线, 通过窄缝进入探测器-样品系统, 其光强为 I_0 。其中一小部分 I_0' 被一个多丝正比室吸收, 用来对

入射光强度漂移进行校正。大部分光强 I_0'' 照射到样品上, 透射后的光强由另一个正比室探测。实验时固定 X 光源, 由步进电机带动单色仪和探测器-样品系统沿一圆形轨道旋转, 以获得不同的 X 光能量, 每次单色仪转过 θ 角, 探测器-样品系统必须转过 2θ 角。

在 EXAFS 谱仪中, X 光强度高达 10^6 光子/s, 采用多丝室为探测器可以提高分辨率和探测效率。在每个角度上, 每个室的多路电信号经快放大器放大后送入单道进行处理。探测

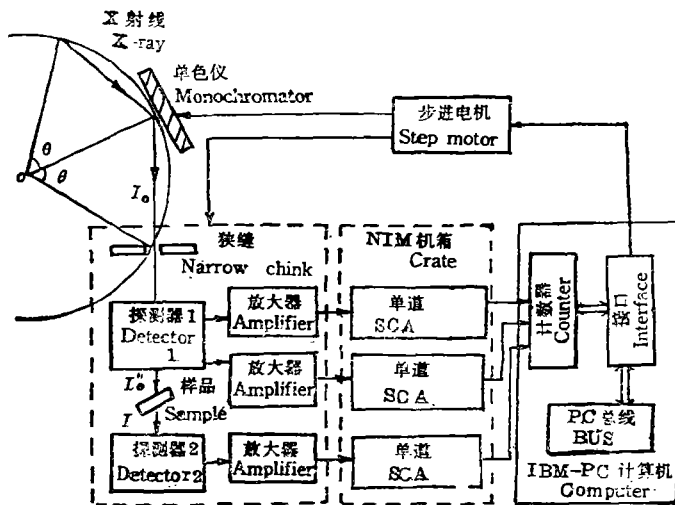


图 1 EXAFS 谱仪总框图

Fig. 1 Block diagram of EXAFS spectrometer

器和两级快放大器装在一小盒内,放大倍数在 1000 倍范围内可调,上片时间为 $0.1\mu\text{s}$,经放大后的信号已达几 V,此信号能通过电缆可靠地送入单道,选择一定能量范围内的脉冲转换成 TTL 电平信号,再送入计数器进行计数。把各路计数值累加起来,获得与 X 光强度相对应的一对对 I' 和 I 数据,通过接口电路把它们送到计算机中进行处理便能获得样品的结构信息。

二、数据采集板

计数电路和接口装在一块 IBM-PC 计算机的扩展接口板上,构成数据采集板(见图 2)。其可用的端口地址为 300H—31FH,PC 总线经驱动后与译码电路相连,提供各种所需的端口地址及读写等信号。

单道送出的三路信号经门控电路 G_1 — G_3 后分别送入三路计数器,每路计数器由 3 个 74LS393 串接而成,这样每次计数最大可达 2^{18} ,每个计数器分别接一个缓冲器 74LS244,三路 I/O 译码电路共 9 个缓冲器提供了 9 个端口地址 (30BH—313H),用 $\text{INP}(\&\tau\text{H}\times\times\times)$ 语句($\times\times\times$ 为端口号)可将缓冲器中的数据分别送入计算机中存放起来。

门控电路由 G_1 — G_3 门及一个 D 触发器构成,译码电路提供的两个口地址 305H 和 306H 分别接 D 触发器的 CLR 和 PR 端,当执行 $\text{OUT } \&\tau\text{H } 305,0$ 语句时,使 D 触发器的 $Q=0$,即关闭计数门。当执行 $\text{OUT } \&\tau\text{H } 306,0$ 语句时, $\text{PR}=0$, $Q=1$,开门计数。对每个采样点计数前,都要对计数器清零,为此只要执行 $\text{OUT } \&\tau\text{H } 304,0$ 语句即可。

此外,译码电路还提供若干个口地址,控制步进马达动作,每采完一个点,使单色仪和探测系统分别转过 θ 和 2θ 角。

三、数据采集程序

由于每点采样时间间隔以秒为单位(较慢),所以全部数据采集程序可用 BASIC 语言写成,这就使编程、使用及修改都极为方便。程序框图见图 3。

主程序可根据需要用人机对话方式预置总的测试点 N 及照射时间 $T(\text{s})$,定时时间利用 PC 机的 $\text{ON TIMER}(T)$ 语句,设置中断陷阱,省去了设计硬件实时时钟电路。

每隔 T 秒采样一个点,时间一到即进入中断服务程序,先关计数门,再送出驱动电机转一定角度的信号,此时计算机可进行累加等简单处理,并将数据显示在屏幕上,待电机转

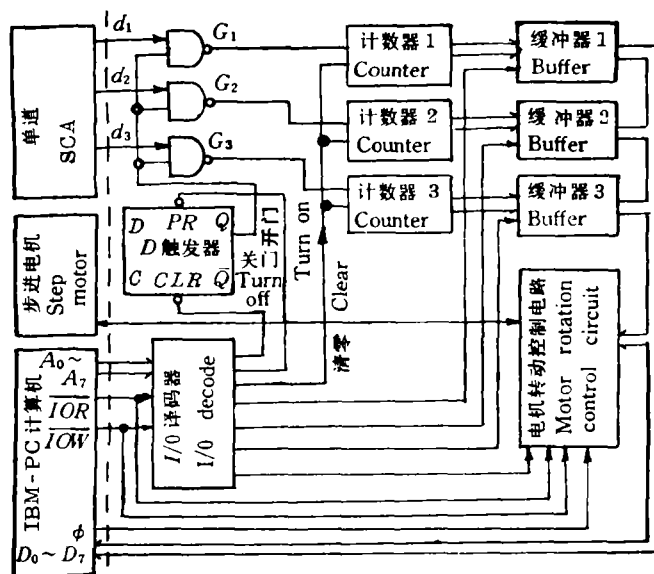


图 2 数据采集板

Fig. 2 Data acquisition plate

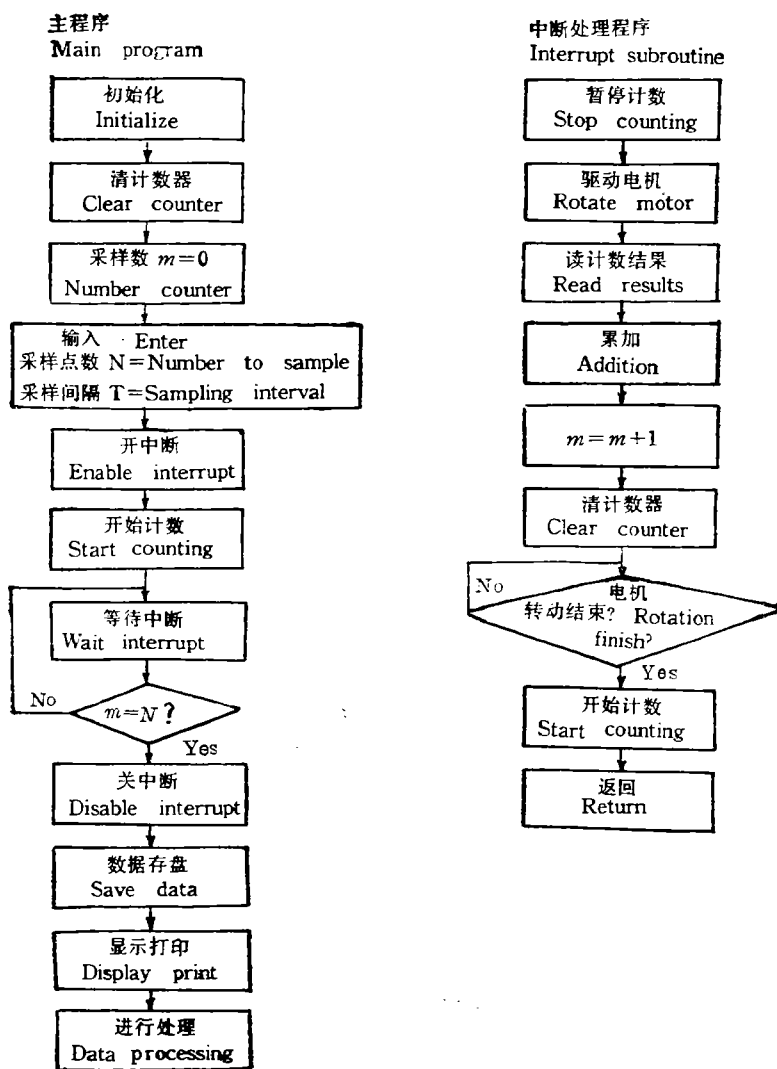


图 3 数据采集程序框图

Fig. 3 Flow chart of data acquisition program

动完成后再开门采下一个点, 一次实验完成后(约 500—700 点)可将采得的数据存盘, 还可以图形方式显示出来以及送打印机打印等。最后由用 FORTRAN 语言编写的专门数据处理程序对这些数据进行进一步分析处理, 便能得到样品的物质结构信息。

本工作得到杨衍明教授的热情指导和金革同志的帮助, 谨致谢意。

参 考 文 献

"Extended X-ray absorption fine structure -its strengths and limitations as a structural tool", Reviews of Modern Physics, Vol. 53, No. 4 Part 1, 1981.

A data acquisition system for EXAFS

Zhou Heqin

(University of Science and Technology of China)

Abstract

In this paper was presented an IBM—PC microcomputer based data acquisition and processing system for EXAFS with MWPC as its detectors. The design principle, hardware circuits and programming methods were described. The data acquisition program was written in BASIC.

Keywords: EXAFS spectrometer Data acquisition Interface

(1989年6月6日收到)