

多路穆斯堡尔谱数据获取与处理系统

金 革 杨衍明

(中国科学技术大学)

本文叙述了一个以BC3-80微型计算机为基础,通过一个以Z80-CPU为中心的控制机与8个带有存贮器的数据获取通道组成的多路数据获取与处理系统。这个系统除能对8个通道的数据进行数据获取外,同时可以对其进行显示、保存和数据处理。它与穆斯堡尔谱仪部件相接,构成一个恒加速穆斯堡尔谱仪系统。

这个系统配上高计数率多丝正比室,可以使穆斯堡尔谱的探测效率大大提高。多丝室中的每根丝的信号分别通过各自的放大器、单道分析器,由相应的数据通道记录下来,然后由微机进行相加和处理。另一方面,这个系统还可以利用不同的通道同时测出样品的透射谱和散射谱,同时得到样品的内部和表面信息。

关键词: 穆斯堡尔 数据通道 数据获取

一、数据获取系统简介

数据获取系统框图如图1所示,它由获取单元、控制机和微机系统三部分组成。

数据获取单元共有8个数据通道,每个数据采集通道中有1024个存贮单元,在控制机的控制和管理下对单道分析器输出的脉冲进行计数和记录,各个数据通道之间是相互独立的,可以同时记录不同单道分析器输出的脉冲。

控制机是整个系统的控制核心,它控制着整个系统的数据获取过程。它由一个由Z80-CPU、CTC、PIO、ROM、RAM构成的处理机和定时单元以及相应的电路组成。CPU是控制机的中心,由它发出各种指令来控制和管理各单元的工作。CTC被CPU初始化成定时工作方式,每隔一定时间由CTC发出一中断定时脉冲,这个脉冲作为系统道地址步进脉冲。PIO是CPU和微机联络口,CPU通过对PIO口的扫描来接受微机发来的命令和程序。控制机有自己的监控程序,固化在ROM中。RAM是控制机的用户区,它由两部分组成。一部分存放数据的采集程序,另一部分提供给各数据通道,作为数据存贮器地址。定时单元是用来将CTC发出的中断定时脉冲成形为各种控制脉冲,同时它提供振动物子振动需要的方波。这个方波由三角波发生器转换成三角波,经放大后驱动振动物子。

系统中采用BC3-80微型机(和TRS-80机兼容),在这个微机系统中,配有图形显示器、磁盘、打印机或绘图仪。微机在测谱以前通过PIO口向控制机装入采集程序,然后发出命令使其运行。当控制机进行采集时,微机便可以脱离系统,从事其它方面的工作,或者关机。也可以不脱离系统,通过接在微机上的高分辨图形显示器对所测谱进行实时显示。采集结束以后,微机将数据读入内存,做成磁盘文件保存在磁盘上。

在本系统中建立了两条总线,即内总线 and 外总线。内总线即控制机总线,其地址空间中0000H—0700H存放控制机的监控程序,2000H—2FFFH为RAM区存放数据采集程序。8条数据总线通过PIO口和微机数据总线相联。外总线为数据存贮器总线,占用3C00H—3FFF

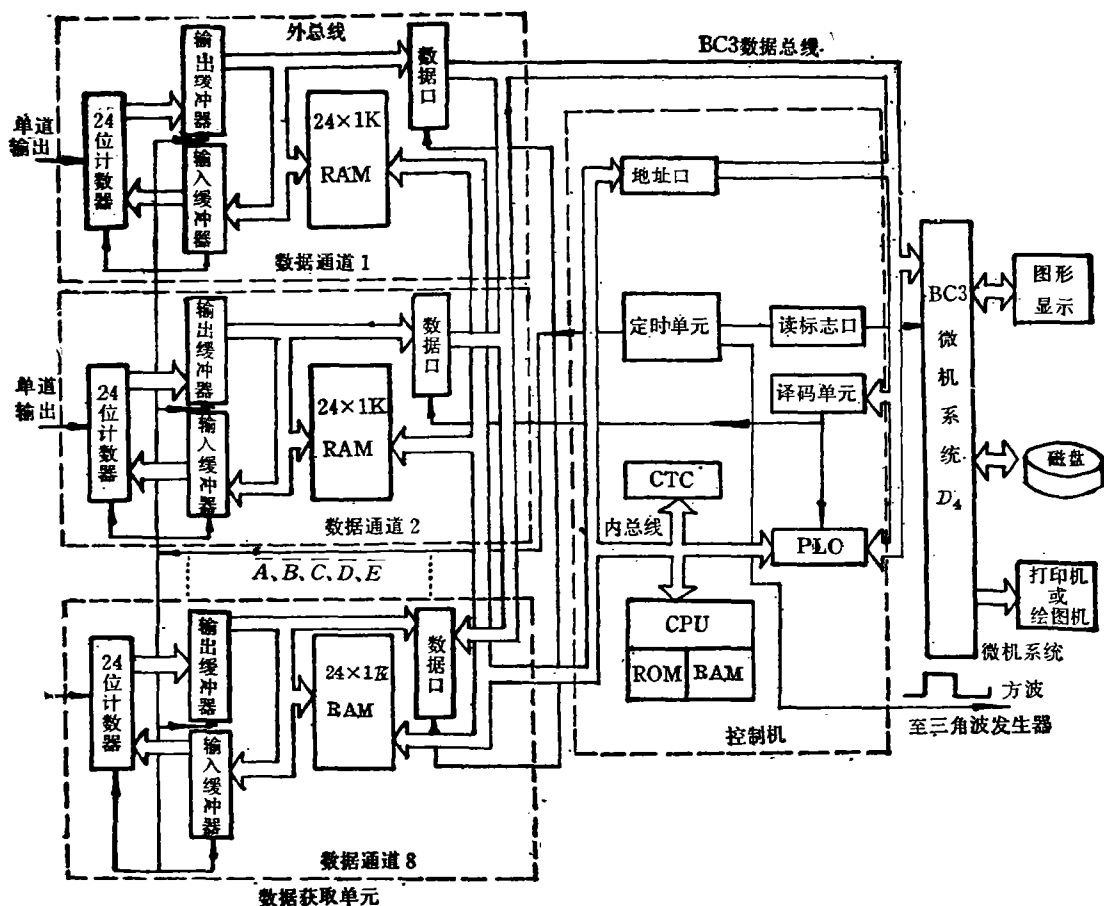


图1 数据获取系统框图

的地址空间，外总线的数据线为24条，通过数据口进行24→8位转换后与微机数据总线相联，微机通过数据口可以分三次将通道中的每道计数从输出缓冲器中读入微机内存。

二、工作过程说明

1. 微机的工作流程图(图2)

测量前，微机先从磁盘上调入控制机的数据采集程序，根据当时的实验条件和要求，通过人一机对话调整程序中的实验参数，然后通过PIO口装入控制机，并用键盘发出命令使其运行，进入数据采集状态，同时微机也进入了键盘扫描状态。在这个状态下，微机具有下述8个功能：

(1) 通讯功能：在控制机进入数据采集状态以后，通过PIO-B口仍然和微机保持通讯联系。在每个地址扫描周期即方波周期结束时，检查PIO-B口是否有微机发来的命令字。如果有命令发来，就转到相应的命令操作；如果没有则继续下一地址扫描周期。微机发出的命令有启动、清除存储器、关闭计数门、清各状态触发器、退出等等。

(2) 读数据功能：在测谱过程中，微机可以随时从各数据通道中读入数据。微机读数据的过程是先从地址口中读出当前的道地址信息，将其映射到内存的某一地址，然后通过数据

口分三次从输出缓冲器中将数据读入内存。为了防止在读数据的过程中,由于中断定时脉冲ZC/TD的到来使得输出缓冲器中的数据发生变化而引起的读数错误,必须保证其读数过程在第二个ZC/TD到来前完成,为此在控制机中设置了一个读标志口。由ZC/TD成形一个允许读标志,这个标志的存在时间 T 为: $T_S < T < T_P - T_R$ 。其中, T_S 为微机读取该标志的时间, T_P 为每道的停留时间, T_R 为微机读一道数据的时间。微机在读数据前,先检查读标志口,如允许读,则读该道数据,否则继续检查标志口。

(3) 预处理:包括对已读入数据的转换,对各路数据的相加和对镜象谱进行对折等处理。

(4) 显示:谱形和数据的显示用接在微机上的图形显示器来实现。由于由微机控制,采用软件显示,显示方式相当灵活,既可以显示谱形,也可以显示出数字,并且还可以对谱形进行加工和处理,如放大、缩小、移动、打印和存盘等。

(5) 打印:利用接在微机上的打印机可以很方便地打印所记录的道数据或某一感兴趣区间的数据,也可以将图形显示器上显示的谱从打印机上打印出来。

(6) 存盘:在测量结束时,微机将各通道所测数据依次读入内存,做成磁盘文件保存在磁盘上。

(7) 读盘:存在磁盘上的文件可以利用此功能从盘中读入内存。

(8) 停机:在测量达到要求以后,微机向控制机发出关闭计数门命令,然后依次读入各通道数据,存入磁盘。

2. 控制机工作过程

控制机在收到微机发来的运行命令以后,首先将其中的CTC初始化为定时工作方式,使其按照给定的时间常数发出中断定时脉冲ZC/TD作为谱仪的道地址步进脉冲。ZC/TD通过定时单元产生一个控制脉冲序列 $\bar{A}$ 、 B 、 $\bar{C}$ 、 $\bar{D}$ 、 $\bar{E}$ 来完成对各数据通道数据采集的控制。控制脉冲的时序关系如图3。

当ZC/TD脉冲来了以后,下一个时钟的上升沿使 $\bar{A}$ 信号有效。 $\bar{A}$ 信号控制着计数器的计数,当其有效时,计数器被封锁,不能再计数;再下一个时钟被成形为 B 脉冲,它将计数器中的数据并行的打入输出缓冲器; $\bar{C}$ 将计数器清除; $\bar{D}$ 将输入缓冲器的输出打开; $\bar{E}$ 将输入缓冲器的数据并行的打入计数器。之后 $\bar{A}$ 信号再次变高,计数器就在现

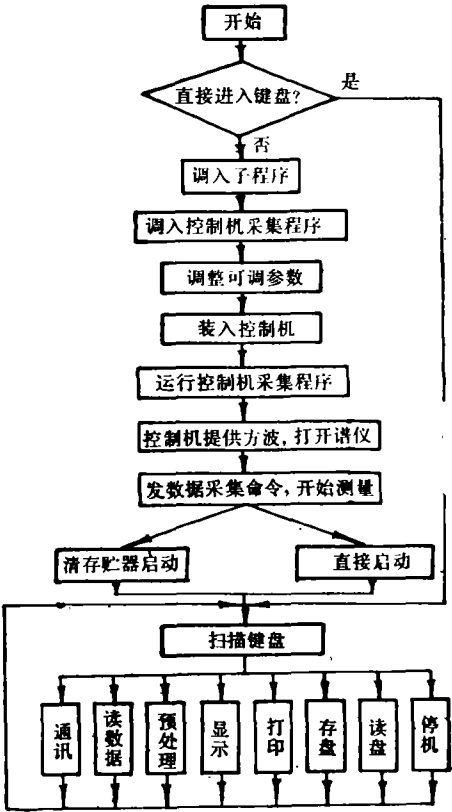


图2 微机工作流程图

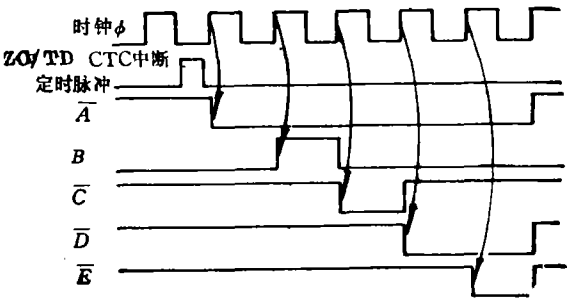


图3 控制脉冲时序

有的计数上对单道输出的脉冲计数进行累加,直到下一个ZC/TD到来时再次重复上述过程。从上面的分析可以看出,由于每个通道中设置了一个输出缓冲器和一个输入缓冲器,使得记录数据的死时间完全由 $\bar{A}$ 信号的宽度来决定,这个宽度为5个时钟周期,对于2MC的时钟,宽度为 $2.5\mu\text{s}$ 。

在CTC发出中断定时脉冲的同时,向CPU提出中断请求,CPU立即进入中断子程序。中断子程序首先将当前的地址送入道地址口中,以供微机读数据时用。然后将输出缓冲器的内容存入通道中的存贮器,将下面要采集的道的计数送入输入缓冲器中,再将地址步进到下一道,退出中断,等待CTC再提出中断请求。

控制机中BC寄存器监视着道地址,当记录到最后一道时,自动返回零道,进行下一道地址周期的扫描。

定时单元除了提供 $\bar{A}$ 、 B 、 $\bar{C}$ 、 $\bar{D}$ 、 $\bar{E}$ 等控制脉冲外,还提供恒加速穆斯堡尔谱仪所需要的方波。这个方波是根据总的记录道数对中断定时脉冲进行分频。这样方波周期即振动子的振动周期和道地址扫描周期就完全同步起来,对于每一道地址有一确定的速度区间。为了提高振动子的振动速度,应尽量减少每道的停留时间。上面所述的采用分频的办法而不是利用软件来得到方波正是为了这一目的,用硬件产生方波可以节省CPU的时间,使之能尽可能早的结束中断子程序。另外,微机读数据的方式设计成直接从通道的输出缓冲器中读数据,这样微机读数据和控制机存贮数据可以同时进行,因此每道的最小停留时间由微机读数时间和控制机存贮数据时间中较大的来决定。前者为 $130\mu\text{s}$,后者为 $90\mu\text{s}$ 。这样每道的停留时间就不能小于 $130\mu\text{s}$ 。为了进一步减少这个时间,微机采用了隔道读数据的方法,这样微机对每一道数据的读取时间就为两个道的停留时间,这时决定每道停留时间的因素就由控制机的存贮时间来决定。因为存贮时间为 $90\mu\text{s}$,所以本系统中的道停留时间可以做到小于 $100\mu\text{s}$ 。而这时微机的读数据时间大于 $180\mu\text{s}$,满足大于 $130\mu\text{s}$ 的要求。

三、谱形显示器

在测谱过程中,谱形的显示是必不可少的。但是BC3微机上没有图形显示,在字符显示器上只能得到粗糙的图形,很难满足使用的需要。下面介绍在BC3微机上附加一图形存贮板做成的图形显示器(见图4)。

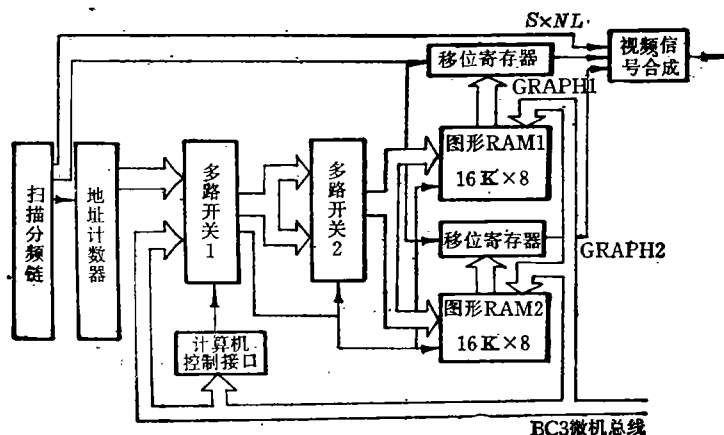


图4 图形显示器框图

这个图形显示器采用光栅扫描的工作方式,图形画面由两帧扫描叠合而成,每帧像素为288(垂直)×384(水平)。两帧像素在水平方向上交错镶嵌,获得288×768的像素陈列。两个16K×8动态RAM分别存贮着上述的两帧图形。扫描分频链和地址计数器产生出互相协调的扫描同步信号和逐次加1的地址信号。两个存贮器按照所提供的地址信号,周而复始地依次读出各单元的内容,经移位寄存器移位输出,产生两路视频信号,经过镶嵌混合后,再与同步信号混合,送往显示器的视频输入端。多路开关1管理存贮器总线的切换。当计算机需要对存贮器进行读写操作时,多路开关1将存贮器总线与微机总线相联。此时,图形RAM直接占据微机的内存空间,微机可使用访问内存的指令对图形RAM进行读写。在此期间,图形显示暂时中止。读写操作完后,多路开关1、2将存贮器总线交由扫描分频链和地址计数器管理,恢复正常显示。

四、数据处理

穆斯堡尔谱的理论解析式是若干洛仑兹线在背底线上的叠加,它的表达式为:

$$y_r = E + Fx_r + Gx_r^2 + \sum_{i=1}^{NS} \sum_{j=1}^K \frac{A_{ij}}{1 + \left(\frac{x_r - p_{ij}}{B_{ij}} \right)^2}, \quad r=1, 2, \dots, M \quad (1)$$

式中, A 是峰的下沉, p 是峰的位置, B 是峰的半高宽, x_r 表示第 r 道, $E + Fx_r + Gx_r^2$ 是背底, y_r 是第 r 道的理论值, NS 是理论谱的套数, K 是每套谱中峰的个数。

对单峰谱 $K=1$, 四极分裂谱 $K=2$, 磁谱 $K=6$ 。

每套谱的峰位 p_{ij} 可以由同质异能移 AIS_i , 超精细场 HE_i 和电四极分裂 SQ_i 三个参变量来表示:

$$p_{ij} = (a_{ij}HE_i + \beta_{ij}SQ_i + AIS_i) / CAL + D_0 \quad (2)$$

式中, CAL 是标定常数, D_0 是中心道数, a_{ij} 和 β_{ij} 分别是第 i 套谱第 j 峰的系数, 对 ^{57}Fe 来说, 单峰谱时, $a_{ij}=0$, $\beta_{ij}=0$; 四极分裂谱时, $a_{ij}=0, 0$, $\beta_{ij}=-0.5, +0.5, j=1, 2$; 磁谱时, $a_{ij}=-0.016077, -0.009306, -0.02535, 0.002535, 0.009306, 0.016077, \beta_{ij}=0.5, -0.5, -0.5, -0.5, -0.5, 0.5$ 。

如果以同质异能移位 AIS , 超精细磁场 HE 和电四极分裂 SQ 作为参量, 那么(1)式可以写成以 $A, B, AIS, HE, SQ, E, F, G$ 为参量的形式:

$$y_r = y_r(x_r, E, F, G, A, \dots, B, \dots, AIS, \dots, HE, \dots, SQ, \dots) \\ = E + Fx_r + Gx_r^2 + \sum_{i=1}^{NS} \sum_{j=1}^K \frac{A_{ij}}{1 + \left\{ \frac{x_r - [(a_{ij}HE_i + \beta_{ij}SQ_i + AIS_i) / CAL + D_0]}{B_{ij}} \right\}^2} \quad (3)$$

设实验测得 n 对数据 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ 。根据上面的理论解析式, 可用实验数据来确定表达式中的待定参数。

高斯牛顿法最小二乘法拟合:

对于给定的 n 对数据点 $(x_i, y_i), i=1, 2, \dots, n$, 要求确定 $y=f(x, B)$ 中的非线性参数 B , 使得:

$$Q = \sum_{K=1}^n \frac{1}{y_K} [y_K - f(x_K, B)]^2$$

为最小。式中 x 可以是单个变量或是 P 个变量即:

$$x = (x_{1K}, x_{2K}, \dots, x_{PK}) \quad K=1, 2, \dots, n_0$$

参数 B 也可以是单个或 m 个参数即:

$$B = (b_1, b_2, \dots, b_m) \quad (m \leq n)$$

预先估计 b_i 的一个近似值, 记为 $b_i^{(0)}$, 并记初值与真值之差为 Δ_i :

$$b_i = b_i^{(0)} + \Delta_i \quad i=1, 2, \dots, m$$

这样确定 b_i 的问题就化成了确定 Δ_i 的问题。为确定 b_i , 在 $b_i^{(0)}$ 附近对 f 作泰勒级数展开, 并略去 Δ_i 的高次项:

$$f(x_K, b_1, b_2, \dots, b_m) = f_{K0} + \sum_{i=1}^m \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_i} \Delta_i \quad (5)$$

式中, $f_{K0} = f(x_K, b_1^{(0)}, b_2^{(0)}, \dots, b_m^{(0)})$

$$\frac{\partial f_{K0}}{\partial b_i} = \frac{\partial f(x_K, b_1, b_2, \dots, b_m)}{\partial b_i} \bigg|_{\substack{b_1=b_1^{(0)} \\ b_2=b_2^{(0)} \\ \vdots \\ b_m=b_m^{(0)}}}$$

当 $b_i^{(0)}$ 给定时, 它们都是自变量 x 的函数, 可以直接算出来。代入式(4)得:

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{k=1}^n \frac{1}{y_K} \left[y_K - \left(f_{K0} + \sum \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_i} \Delta_i \right) \right]^2 \\ \frac{\partial Q}{\partial b_i} &= \frac{\partial Q}{\partial \Delta_i} = 2 \left[\Delta_i \sum_{k=1}^n \frac{1}{y_K} \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_i} \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_i} + \dots + \Delta_m \sum_{k=1}^n \frac{1}{y_K} \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_m} \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_i} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{k=1}^n \frac{1}{y_K} \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_i} (y_K - f_{K0}) \right] = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

记 $a_{ij} = \sum_{k=1}^n \frac{1}{y_K} \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_i} \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_j}, \quad a_{ij} = \sum_{k=1}^n \frac{1}{y_K} \frac{\partial f_{K0}}{\partial b_i} (y_K - f_{K0})$

于是得 $\Delta_i, i=1, 2, \dots, m$ 的 m 个联立方程组

$$\begin{aligned} a_{11}\Delta_1 + a_{12}\Delta_2 + \dots + a_{1m}\Delta_m &= a_{1y} \\ a_{21}\Delta_1 + a_{22}\Delta_2 + \dots + a_{2m}\Delta_m &= a_{2y} \\ \vdots & \\ a_{m1}\Delta_1 + a_{m2}\Delta_2 + \dots + a_{mm}\Delta_m &= a_{my} \end{aligned}$$

当数据点 $(x_K, y_K), K=1, 2, \dots, n$ 和初始值 $b_i^{(0)} i=1, 2, \dots, m$ 给定时, 系数 a_{ij} 及右端的 a_{iy} 均可以算出来, 因此可解得 Δ_i , 进而得到 $b_i = b_i^{(0)} + \Delta_i$ 。

但实际上, 初始值 $b_i^{(0)}$ 未必十分接近于真实值 b_i , 因此泰勒展开式(5)略去较高次项的结果是粗略的, 从而求得的 $b_i = b_i^{(0)} + \Delta_i$ 并不是最佳估计值。不过常常比 $b_i^{(0)}$ 更接近于真实值。如果这时 $Q < Q_0$, 这样的修正称为收敛的, 相反则称为发散的。如果修正是收敛的, 则可令 $b_i^{(0)} = b_i$, 重复上述计算过程, 得到新的 b_i 。如此反复迭代, 直到 Δ_i 可以忽略, 则求得的参数 b_i 可以认为是待求的值, 计算便可以停止。

采用牛顿-高斯法拟合谱线使用内存小、计算速度快、不易发散, 适用于象BC3微机这样的内存小、速度慢的机种。迭代的初值由键盘打入, 数据直接从磁盘中读入。程序内设置了三个判决条件, 迭代一次大约花8分钟。迭代结束后, 计算线宽、峰位、下沉、零速度位置、

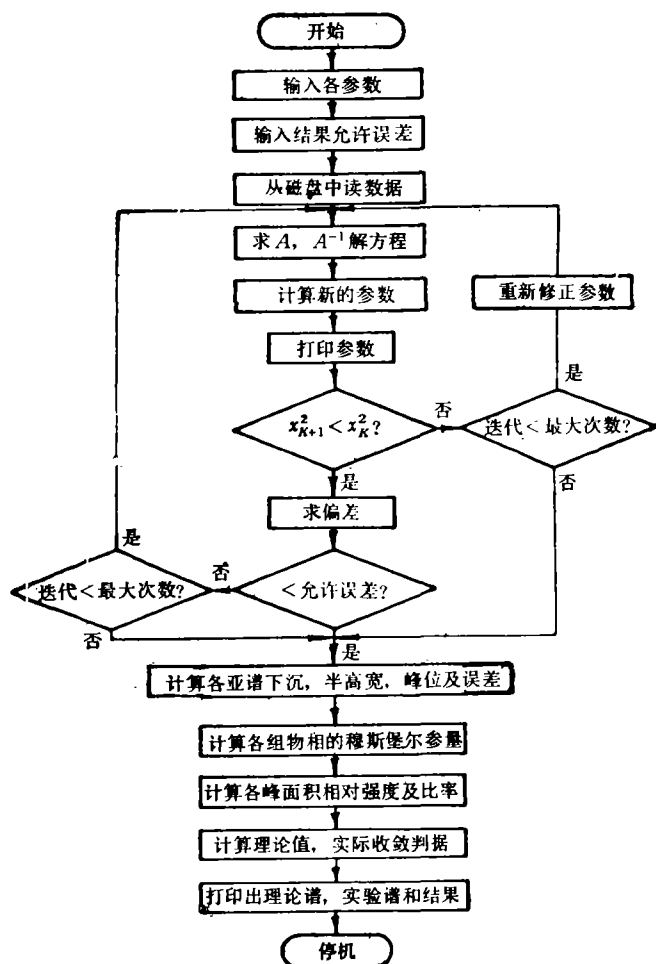


图5 拟合程序流程图

x^2 值、面积、速度增量及误差。程序的流程如图5所示。

利用本程序对实验数据进行拟合的结果如表所示。

五、结束语

本系统由于采用了智能接口和微机,使系统具有下列优点:

1. 能同时进行多路数据采集,采集由智能接口完成,微机可以不介入采集过程。微机可直接处理数据。

2. 因为用软件控制和管理整个系统的数据采集,所以要改变运行方式是比较方便的。如要改变每道的停留时间或振动子的振动周期只须改变CTC的时间常数。另外,由于控制机有监控程序支持,所以只要改变采集程序就可以进行其它有点多度定标方面的测量。

3. 由于在各数据通道中设有输入、输出缓冲器,使测量死时间大大减少。

表 实验数据拟合结果

峰 号	1	2	3	4	5	6
峰位(道)	40.812	76.851	112.830	139.691	175.540	212.030
(mm/s)	-5.312	-3.074	-0.836	0.833	3.050	5.311
误差(%)	0.08	0.05	0.04	0.04	0.02	0.02
峰宽(道)	4.751	4.413	3.805	3.812	4.405	4.800
(mm/s)	0.295	0.274	0.236	0.237	0.274	0.300
误差(%)	2.14	2.51	4.50	4.81	2.56	2.05
下沉(计数)	39990	34914	21003	20220	34512	41065
(%)	18.83	16.44	9.87	9.51	16.25	19.30
误差(%)	1.33	1.60	2.95	3.00	1.63	1.28
面积(%)	22.33	18.09	9.37	9.07	17.79	23.35

(下转第4页)

其余的都在7%以下。用称重法测得的数据大多偏低,估计是由于所制的金膜之比重要低于金的标准比重所致。

用能量损失法和面积法所求出的溅射率 Y 随能量变化的趋势基本上是一致的,但用能量损失法算出的溅射率都要大于用面积法算出的溅射率。对能量损失法影响较大的因素是能谱半宽度的确定。除了由能量分辨率所引起的能谱曲线边缘的移动之外,还有从几何作图法本身所引进的偏差。对面积法而言,重要的是剂量归一化。因此分析束流的积分与二次电子抑制的好坏都会直接影响到测试结果。

本文的实验结果表明,用背散射法来测定溅射率是行之有效的方法,所得到的结果与前人的实验结果符合得较好。

参 考 文 献

- [1] 阿滕康郎,真空(日),23,339(1980)。
- [2] N. laegreid and G. K. Wehner, *J. Appl. Phys.*, 32, 365 (1961).
- [3] R. Behrisch and R. Weismann, *Phys. Lett.*, 30A, 506 (1969).
- [4] Z. L. Liao et al., *J. Vac. Sci. Technol.*, 16, 1—3, 121 (1979 R).
- [5] 陈国明等,电子技术,5,5(1980)。
- [6] Ion Beam Analysis Group, Shanghai Institute of Metallurgy and Shanghai Institute of Nuclear Research, *Inter. J. Electr.*, 46, 5, 513(1979).
- [7] H. Von. Seefeld et al., *J. Nucl. Mater.*, 63, 215(1976).
- [8] J. F. Ziegler, Helium stopping powers and ranges of ions in matter, Pergamon Press, New York, 1977.
- [9] Yasuhiro Yamamoto, *Japan. J. Appl. Phys.*, 15,11, 2285 (1976).

(1985年6月6日收到)

(上接第14页)

(续表)

编 号	1	2	3	4	5	6
误差(%)	2.52	2.98	5.46	5.73	3.03	2.41
参 数	<i>SQ</i> (KEO)	<i>HE</i> (mm/s)	<i>AIS</i> (mm/s)	<i>E</i>	<i>F</i>	<i>G</i>
	330.37	0.022	0.007	212409	-2.90	0.01
参 数	中心道 D_0 (道)	标定常数(mm/s·道)	叠代次数	平方偏差	最大值	最小值
	126.3	0.062	3	325.36	213286	171327

参 考 文 献

- [1] 计声编,微计算机实用手册,海洋出版社,1982年。
- [2] 李士等,原子能科学技术,6.671(1981)。

(1986年12月5日收到)

Multi-channel data acquisition and processing system for Mössbauer spectroscopy

Jin Ge Yang Yanming

(University of Science and Technology of China)

A multi-channel data acquisition and processing system for Mössbauer spectroscopy is described, which consists of an intelligent interface and a BC3-80 microcomputer.

The system has eight data channels, each channel contains a counting circuit and a memory. A Z80-CPU is used as a main unit for control and access. The microcomputer is used for real-time displaying spectrum, saving the data to disk, printing data and data processing.

The system is applicable to a high counting rate multi-wire proportional chamber. It can increase greatly the counting rate for measuring Mössbauer spectrum. The signals of each wire in the chamber go through a corresponding amplifier and a differential discriminator and are recorded by a corresponding data channel, the data of each channel is added by the microcomputer. In addition, we can use two channels to measure an absorption and a scattering spectrum at the same time and obtain the internal and the surface information of the sample simultaneously.

Keywords: Mössbauer data channel data acquisition

An investigation of the effect of oxygen impurity on the formation of WSi_2 and its properties by means of $^{16}\text{O}(\alpha, \alpha)^{16}\text{O}$ resonance scattering

Ding Xunliang Wang Zhonglie Qian Yahong

(Low Energy Nuclear Physics Institute, Beijing Normal University)

The oxygen concentration and depth profile in the Si-W multilayer samples were measured by using the $^{16}\text{O}(\alpha, \alpha)^{16}\text{O}$ resonance scattering at 3.042 MeV. The reaction between tungsten and silicon and the formed WSi_2 by ion beam mixing were studied as a function of the concentrations of oxygen impurity. It has been found that at a low oxygen content, hexagonal WSi_2 was formed during the radiation of samples at 350°C with As^+ . The silicide was transformed into tetragonal WSi_2 at 700°C annealing. At higher oxygen content, hexagonal WSi_2 was not observed. The tetragonal WSi_2 was formed at 950°C annealing. The tungsten and silicon was mixed uniformly and the formed WSi_2 films with larger grains have lower resistivities in the samples which contain lower oxygen content.

Keywords: resonance scattering oxygen impurity ion beam mixing
refractory metal silicide