

基于 Labview 的 XAFS 光束线实验站 数据采集系统

邹 杨 顾颂琦 姜 政 魏向军 马静远 黄宇莹 徐洪杰

(中国科学院上海应用物理研究所 上海 201204)

摘要 本文介绍应用 Labview 软件、气体电离室、电流放大器及数据采集卡等仪器设备构成的同步辐射 XAFS (X-ray absorption fine structure) 光束线站(BL14W1)数据采集系统。该系统利用 NI 公司开发的新模块 DSC module (Datalogging and Supervisory Control Module), 实现了在 Labview 和 EPICS(Experimental and Physics Industrial Control System)两个软件系统间数据的快速交换, 使光束线控制的标准化和实验站用途的多样化有机结合。用 Labview 编写了数据采集软件, 使该线站成功实现步进(step-by-step)模式和快扫(QXAFS)模式下的 XAFS 谱的采集。

关键词 同步辐射, EPICS, Labview, DSC, XAFS

中图分类号 TG115.22, TL503.6, TL816*.1, TP274*.2

上海光源(SSRF)是利用同步辐射开展多学科研究的大型科学实验装置, 可建数十个光束线和实验站。X 射线吸收精细结构谱(XAFS)光束线(BL14W1)是其首批七条束线之一。XAFS 是随着同步辐射装置的发展而成熟起来的实验技术, 是研究物质结构的重要实验方法^[1]。

由于 X 射线吸收和散射, X 射线的透射强度为 $I = I_0 \times e^{-\mu d}$, 其中, I_0 为入射强度, μ 为线衰减系数, d 为物质厚度。当 X 射线的能量等于两个电子轨道能级的能量差值且跃迁允许时, 受照射原子对于 X 射线的吸收系数大大增加, 即出现这一能量的吸收边。X 射线吸收谱, 就是以某特定种类原子吸收边附近的 X 射线能量为 X 轴、以相对于此种能量的吸收系数为 Y 轴作成的曲线。由于受照射的中心原子周围(0.1–1 nm)还存在其他原子, 因此 X 射线吸收谱的边后(约 1000 eV)有类似于正弦信号的振荡, 在边和边前(约–20 eV)会有些小肩峰和边前峰。由这些信号可反推出中心原子周围的近邻原子的种类、配位数及配位距离等信息, 为研究此类信号而采集的高分辨率的 X 射线吸收谱, 即 XAFS。

XAFS 采集需两方面的信息, 一是吸收边附近(–200–1000 eV)的不同能量 X 射线的吸收系数, 二是对应于此吸收系数的 X 射线的能量。同步辐射光束线采用双晶单色仪获得单色 X 射线, 调整其相对

于同步辐射白光的人射角来选取 X 射线能量。对于吸收系数的测量, 常用透射法和荧光法。透射法(主要用于高浓度样品和标准样品的测量), 是在样品前后各置一个气体电离室, 计算 X 射线穿越两电离室时电荷信号的比值, 可得吸收系数。荧光法(主要用于低浓度样品的测量)则是将透射法中的第二电离室换成荧光电离室, 测量荧光信号的强弱。

SSRF 储存环及光束线控制主要采用 EPICS 分布式控制系统。但 XAFS 实验站对于数据采集和预处理有特殊要求, EPICS 控制系统并不能够完全满足实验站数据采集的需求, 须设计 XAFS 谱采集程序。早期的 XAFS 谱采集程序由 C 语言或者 Basic 语言等编写, 随着计算机科学技术的发展, 现多采用自动化测量和控制专业软件编写, 如我国的北京同步辐射装置(BSRF)的 1W1B 光束线^[2], 英国 SRS 的 Beamline 9.3 光束线^[3]和美国 APS 的 PNC-CAT 光束线^[4]等, 都使用 Labview 编写控制和采集程序。

本文介绍我们利用 Labview 软件、气体电离室、电流放大器及数据采集卡等仪器设备, 在 BL14W1 光束线的 XAFS 实验站构建的数据采集系统。

1 数据采集硬件系统

BL14W1 硬件系统(图 1)的实验站部分由前后电离室、高压电源、低噪音电流放大器、ADC 和计

国家自然科学基金(10705046)与中国科学院知识创新工程领域前沿项目资助

第一作者: 邹杨, 男, 1982 年出生, 2003 年毕业于清华大学, 现为上海应用物理研究所博士研究生

通讯作者: 徐洪杰

收稿日期: 2009-03-16

算机组成, 光束线部分包括双晶单色仪、马达驱动器和 VME 机箱。

前后电离室为 Oxford Danfysik 公司的 IC Spec 型气体电离室, 腔内气体 0.5–2 bar 可调, 工作电压 3000 V。前后电离室引出的弱电流由各自的放大器转换成 0–10 V 的电压信号, 输到 ADC。低噪音电流放大器为 Femital 公司的 DLPCA-200 型, 可通过 RS232 接口远程控制, 工作方式有高速模式和低噪音模式, 增益从 1×10^3 到 1×10^{11} 可调, 带宽最高为 500 kHz。数据采集采用 GSC 公司的

PMC66-16aiss8ao4 型 16 位 ADC, 通过 PMC-PCI 的转接板插入计算机。该型 ADC 可以 2 M samples/s/channel 的速率进行 8 通道同时采集, 输入电压可为 $\pm 10\text{V}$ 、 $\pm 5\text{V}$ 或 $\pm 2.5\text{V}$, ADC 有一个 256 K samples 的 FIFO 寄存器, 还可通过 DMA(Direct Memory Access)方式进行快速数据传输。国内外有些 XAFS 线站也使用 V/F 转换器进行模数转换, 这种方式的采集程序编写较为简单, 但并不适用于快扫采谱模式(Quick XAFS 或 QXAFS)所需的高精度快速采集, 因此我们选用 ADC 进行数据采集。

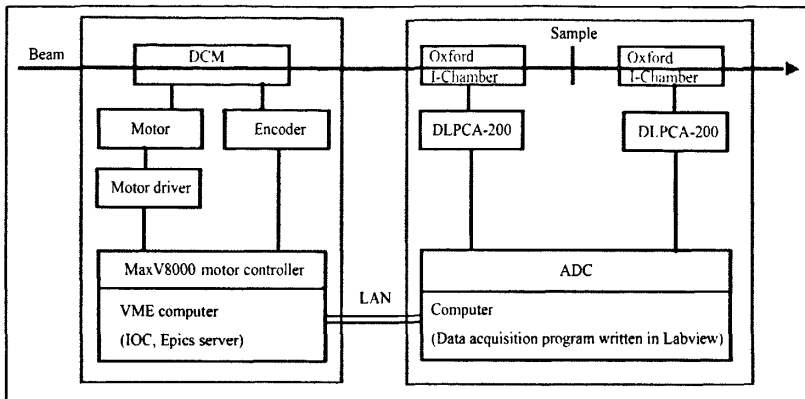


图 1 上海同步辐射装置 BL14W1 光束线实验站数据采集系统
Fig.1 Data acquisition system of the BL14W1 beamline at SSRF.

BL14W1 的双晶单色仪马达由马达驱动器驱动, 马达驱动器由安插在现场 VME 主机上的 MaxV8000 马达控制器控制, VME 主机同 BL14W1 实验站数据采集软件所在的 PC 机通过网络进行通讯。

2 数据采集软件系统

BL14W1 光束线站的采谱模式为步进(step-by-step)模式和快扫(QXAFS)模式^[5-7]。步进模式即能量点扫描模式, 是常用的 XAFS 谱的采集方法。系将双晶单色仪转动到设定的能量点, 通过 ADC 进行两电离室的数据采集, 取数秒内的平均值, 计算该能量点的吸收系数, 再将双晶单色仪转动到下一能量点(间隔约 0.5–3 eV)进行测定。每步从启动到稳定需 0.2–0.5 s, 每能量点的积分时间需数秒, 一个 XAFS 谱采集需 300–500 个能量点, 测量一个 XAFS 谱需 20–60 min。

QXAFS 采谱方法, 则将双晶单色仪转动到初始能量点, 由采集程序发出命令, 让双晶单色仪以

某恒定速度转动到终止能量点, 并同时进行 ADC 数据采集。此采集过程将 ADC 采集数据分割成数千份, 每份的采集时间根据需要约为 2–50 ms, 再对每一时间分隔的数据取平均值, 每一数据点对应的能量由数据点序号和双晶单色仪转速算得。

该数据采集系统用 Labview 软件(NI 公司)编写, 通过 Labview 的 DSC 插件(Data logging and Supervisory Control Module)与 EPICS (Experimental and Physics Industrial Control System)^[8]分布式系统进行通讯。一个 EPICS 分布式系统包括几个 IOC (Input/Output Controller)服务器, 每个服务器包括多个通道和过程变量, 每一过程变量由记录名+域名组成。DSC 插件可以设计和维护分布式监控系统, 完成与 I/O 设备(如 LabVIEW 实时硬件模块和 OPC 设备)的连接。NI 公司在 DSC 模块中特别增加了与 EPICS 的通讯, 可直接通过记录名和域名网络对 IOC 服务器中的过程变量进行访问。BL14W1 采集程序示意图见图 2, 左为步进模式, 右为快扫模式。

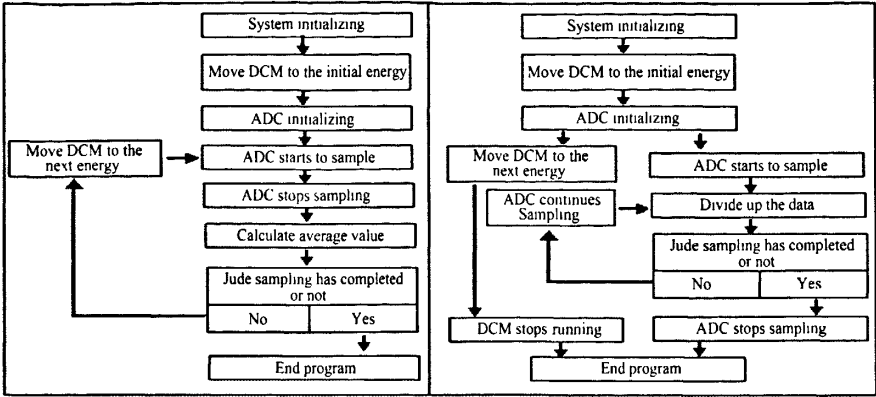


图 2 BL14W1 光束线实验站程序采集框图，左图为步进模式，右图为快扫模式
Fig.2 Schemes of sampling code for the BL14W1 beamline. Left, step-by-step mode; Right, QXAFS mode.

3 XAFS 标准谱及测试

图 3 和图 4 分别为步进模式下和快扫模式下采集的 Cu 的 K 边的 XAFS 谱线。采集条件：储存环电子能量 3.5 GeV，流强 10 mA，第一电离室入口处光子通量 1×10^{10} photons/s，电流放大器放大倍数 10^7 V/A。

步进模式的 XAFS 谱，样品为 6 μm 厚 Cu 箔，ADC 采样频率 500 kHz，采用 10 Hz 高频滤波模式，在近边区域每个点的能量间隔为 0.25 eV，共记录 821 点，采集时间 40 min。

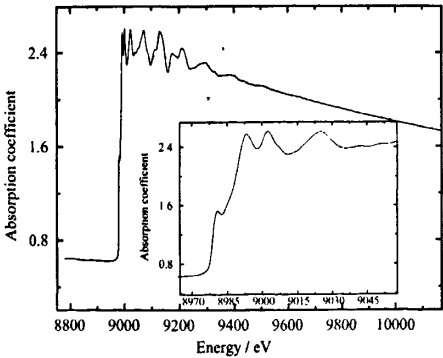


图 3 步进模式下 Cu 箔 K 边的 XAFS 谱
Fig.3 XAFS spectrum of Cu foil measured in step-by-step mode.

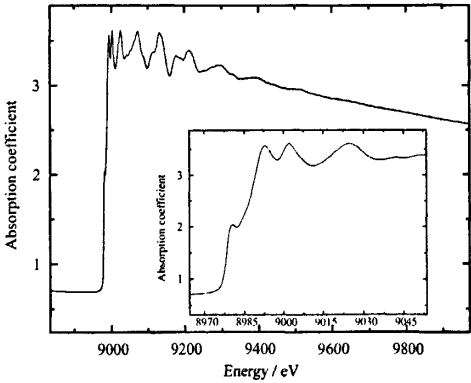


图 4 快扫模式下 Cu 箔 K 边的 XAFS 谱
Fig.4 XAFS spectrum of Cu foil measured in QXAFS mode.

对于 QXAFS 谱，样品为 10 μm 厚 Cu 箔，ADC 采样频率 500 kHz，双晶单色仪马达转动速度 1440 arcsec/s，采集时间 5 s，每一数据点积分时间为 2.5 ms，共 2000 个数据点。

图 5 给出了标准的 XAFS 谱^[9]和该软件采集的普通 XAFS 谱、QXAFS 谱，可见三个谱的标准化曲线、k 空间曲线、以及 R 空间曲线基本相同，这证明上海光源 BL14W1 光束线站的数据采集系统已告成功。

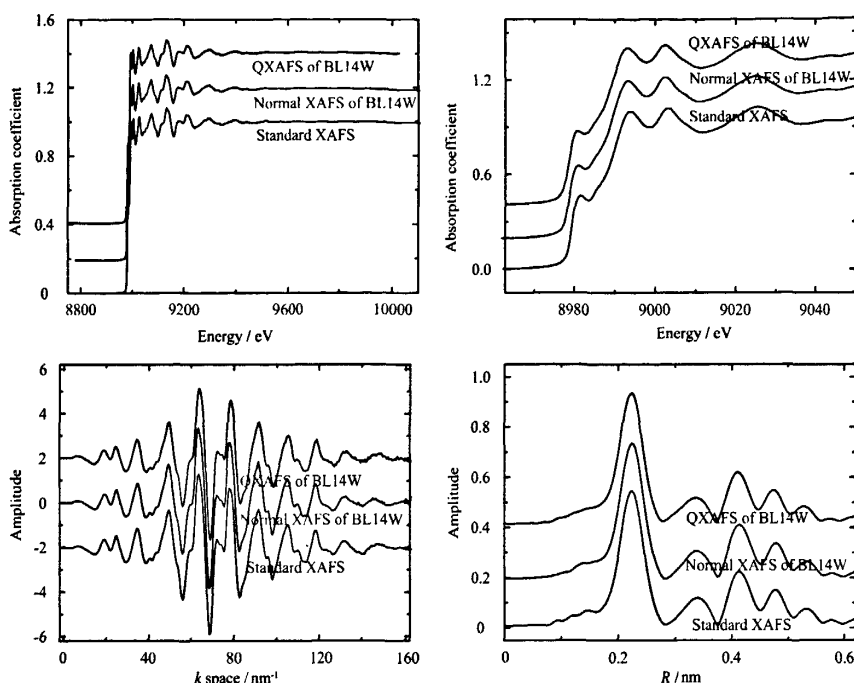


图5 BL14W1 光束线站采集的 Cu 箔 K 边的普通 XAFS 谱、QXAFS 谱与标准 XAFS 谱的对比
Fig.5 Conventional XAFS and QXAFS spectra of Cu foil at K edge measured at BL14W1 beamline in comparison with standard XAFS spectra^[9].

4 结论

上海同步辐射装置 BL14W1 光束线实验站采用 Labview 软件以及实验站现有实验设备, 建立了一套可同 EPICS 控制系统相通讯的数据采集系统, 成功实现了两种采谱模式。经过测试, 上海同步辐射装置 BL14W1 光束线站所采集的 Cu 箔的 K 边的普通 XAFS 谱和 QXAFS 谱与国际上的标准 XAFS 谱线基本完全一致, 这说明 BL14W1 实验站的数据采集系统已经可以投入使用。

致谢 感谢中国科学院上海应用物理研究所同步工程部控制组对于本工作的帮助。

参考文献

- 1 王其武, 刘文汉, 主编. X 射线吸收精细结构谱. 科学出版社, 1994
WANG Qiwu, LIU Wenhan. X-ray absorption fine

structure. Science Press, 1994

- 2 谢亚宁, 胡天斗, 张静. 国外电子测量技术, 2002, 2: 22-24
XIE Yaning, HU Tiandou, ZHANG Jing. Overseas Meas Technol Electron, 2002, 2: 22-24
- 3 Nikolaos Tsapatsaris T, A M Beesley T, Norbert Weiher T. Synchrotron Radiation Instrumentation, 2007, 1739-1742
- 4 <http://pac2001.aps.anl.gov/News/Conferences/1997/nobugs/brewe.html>
- 5 Frahm R. Nucl Instrum Methods in Phys Res, 1988, A270: 578-581
- 6 Frahm R. Rev Sci Instr, 1989, 60: 2515
- 7 Beale A M, Gopinathan Sankar. Chem Mater, 2006, 18: 263-272
- 8 Kraimer M R. EPICS Input/Output 3.14.8, Dec-2005, <http://www.aps.anl.gov/epics/base/R3-14/8.php>
- 9 The data is from Chicago University XAFS library, which was measured in APS 13ID. <http://cars9.uchicago.edu/cgi-bin/newville/Model-Search.cgi>

A Labview-based data acquisition system for the XAFS experimental station at SSRF

ZOU Yang GU Songqi JIANG Zheng WEI Xiangjun

MA Jingyuan HUANG Yuying XU Hongjie

(Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China)

Abstract In this paper, we report the development of a data acquisition system of BL14W1 XAFS (X-ray absorption fine structure) beamline at Shanghai Synchrotron Radiation Facility (SSRF). The data acquisition system includes two ion chambers, two amplifiers, one ADC, Labview software etc. For quick communication between Labview and EPICS, the newly-developed DSC module by National Instruments is used. The XAFS beamline has been a success in accomplishing data acquisition for XAFS spectra in step-by-step mode and Quick XAFS mode.

Key words Synchrotron Radiation, EPICS, Labview, DSC, XAFS

CLC TG115.22, TL503.6, TL816*.1, TP274*.2