

大型仪器功能开发(65~71)

FTS-20E 富里叶红外光谱仪 数据系统改造

朱文彬*

周 密

钟彩元

周 泓

席时权

(中国科学院长春应用化学研究所 长春 130022)

摘 要 报道了 FTS-20E 富里叶红外光谱仪数据系统改造的工作,采用 IBM 486 计算机及新的数据接口取代了陈旧的 NOVA4 数据系统。文章详细描述了其硬件设计和软件编辑。改造不仅更新了 FTS-20E 富里叶红外光谱仪,而且还使其达到 90 年代的水平。

关键词 富里叶红外光谱仪 数据系统 迈克尔逊干涉仪

分类号 O657.33

1 前 言

我们在 80 年代初进口的美国 Digilab FTS-20E 富里叶变换红外光谱仪,经过十几年的使用,数据系统的性能早已落后。近十几年来富里叶变换红外光谱仪尤其是数据系统的技术不断发展,低性能的仪器难以满足当今分析工作的需要,所以我们决定对现有的 FTS-20E 富里叶变换红外光谱仪的数据系统进行技术改造,以满足当前的需要。

2 改造前仪器的技术评估

FTS-20E 富里叶变换红外光谱仪是一台多功能的精密仪器,通过更换不同的光源和分束器可复盖近红外、中红外、远红外三个波段,波数范围为 $10\,000\sim 10\text{cm}^{-1}$,核心部件是 496A 迈克尔逊干涉仪,可进行双光路样品分析。这台仪器光学设计非常好,因迈克尔逊干涉仪采用的是空气轴承,虽经十几年的使用,磨损很小,重复精度仍能满足要求,其它光学元件仍然完好,光学系统经维修校正可继续正常工作。这台仪器原配的数据处理系统由 NOVA4 计算机及相关的接口构成,限于当时的技术,整套设备体积庞大,运算速度慢,故障率高,因无备件无法修理,早已报废。我们根据对整机的分析,确认保留原光学系统的性能,数据系统按当今的技术条件全部更换,使整机性能达到原设计标准。

3 数据系统设计

3.1 控制部分

当进行采样时,红外光经狭缝,进入分束器,由干涉仪调制后的相干光通过样品,样品吸

* 通讯联系人

收的光强度变化被检测器接收,检测器将收集的信息转换成电信号,经放大,由 A/D 转换器转换成 16 位数据信号,通过高速数据采集接口进行缓存和累加运算,组成 32 位数据输入计算机。控制流程见图 1。

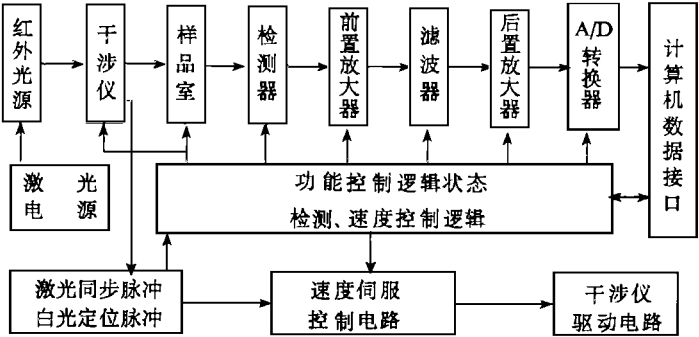


图 1 控制流程图

Fig. 1 The block diagram of the control

控制部分的重点是控制干涉仪匀速重复扫描,在重复扫描过程中,每一次扫描的起点和终点必需完全重合,这样在数据累加时能够把系统产生的不规则噪声滤掉,使有用的信号加强,以此来增加信噪比。因此激光同步脉冲和白光定位脉冲的时序必须准确,误差应尽可能地小,这些问题由伺服控制电路来解决。

3.2 数据收集部分

数据收集部分是接口电路的关键,数据处理系统采用 486/66 计算机,从启动 A/D、得到数据、进行运算、数据存储这一过程的累计指令执行周期仍然很长,在重复扫描时,需要累加数据,必须增加 A/D 输出数据的缓存和由硬件完成数据累加功能,将数据组一次输给计算机进行处理,才能高速完成这一过程。

按照数据传送的要求,扩大了数据缓冲区尺寸,增加硬件运算功能部件(ALU)、外部控制、数据存储逻辑控制,这样在数据采集过程中,控制 A/D 转换器,在缓存数据的同时进行累加运算。累加次数由计算机设定,最终将数据结果一次输入计算机(见图 2)。接口与计算

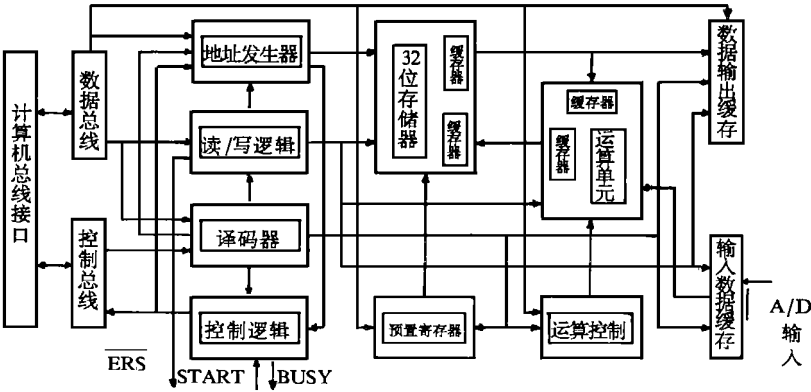


图 2 数据接口原理图

Fig. 2 The block diagram of the data acquisition interface

机通讯采用 16 位数据总线(也可改为 32 位数据总线)。为提高速度,接口内部采用 32 位数据总线,32 位数据分两组(16 位数据)向外输出。内部地址发生器可产生 32 位地址信号,此信号驱动 32 位 32KSRAM 静态存储器。接口内部状态字由计算机根据需要设定,控制逻辑分别控制模拟电路、A/D 转换、干涉仪及控制部分的逻辑功能。A/D 结束信号 EBS 产生内部地址信号 MADD。读/写逻辑将 EBS 信号分解成 MEMR 和 MEMW,在 MEMR 有效期间,同时从 A/D 输出缓冲器读取数据和从存储器材读取前一的数据到 ALU 算术单元累加运算。在 MEMW 有效期间,将累加完成的结果送回存储器。向计算机写数据时,由译码器产生地址信号 MADD,同时读写逻辑产生 MEMO 和 MEMC 信号,。MEMO 有效期间将存储器当前内容传送到输出锁存器,MEMC 有效期间,将当前地址数据清零。START 信号启动 A/D,BUSY 锁定数据通道。工作时序见图 3。

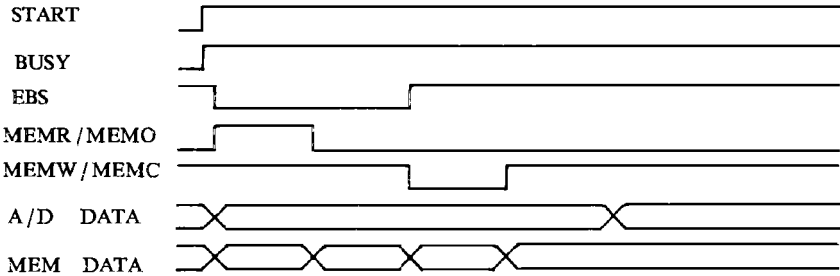


图 3 时序图

Fig. 3 The diagram of the timer

高速数据采集接口完成一次操作仅需 250ns,其中包括存储数据、累加运算、位数变换,从而解决了数据高速传递的问题、电路设计用 PSPICE 计算机辅助设计软件模拟。

数据采集板的制做工艺采取多层布线,缩小布线面积,减小接地电阻,增大地线和电源线的有效面积,降低了线路噪声及回路引起的干扰噪声。

4 软件系统设计

软件系统的主要功能包括以下文件管理功能:

- (1) 谱图文件的打开、关闭、改名、删除、转换格式。
- (2) 打印设置、打印输出、支持 24 针打印机、绘图仪。支持彩色输出。
- (3) 数据编辑,视图管理,可设置谱图的显示格式,坐标设置,修改系统界面。
- (4) 数据采集功能,参数的设定,数据采集,校正,硬件参数设置。
- (5) 峰处理功能,峰值设置及取消,标峰条件设置,峰插入、增添、删除和移动,峰表输出。
- (6) 报告谱图文件的详细信息。
- (7) 图计算功能:吸收谱计算、透射谱计算、Kubelka- Munk 谱计算、富氏变换计算、谱图裁减、谱图算术运算、坐标设定、数据平滑、谱图派生、峰面积计算、Y 值位移、X 值位移、基线校正、谱图相减、去卷积、曲线拟合、修改分辨率、ATR 校说明。正。
- (8) 系统参数选择,用于设置各种系统工作参数。
- (9) 联机帮助提供详细的系统使用说明。

数据采集程序由参数设定、数据采集和干涉图计算三个部分组成。

参数设定模块是数据采集程序的主控模块。利用图形界面生成工具的参数接收对话框，保存所有设置参数。绝大多数参数采用可选项方式，功能选择采用按钮式选择操作。另外，对话框设计为全参数和部分参数两种选用方式，可通过按钮任意转换。因此大大简化操作过程。数据采集根据用户设定的参数完成。参看流程图4。图中的“硬件检测”是指对数据

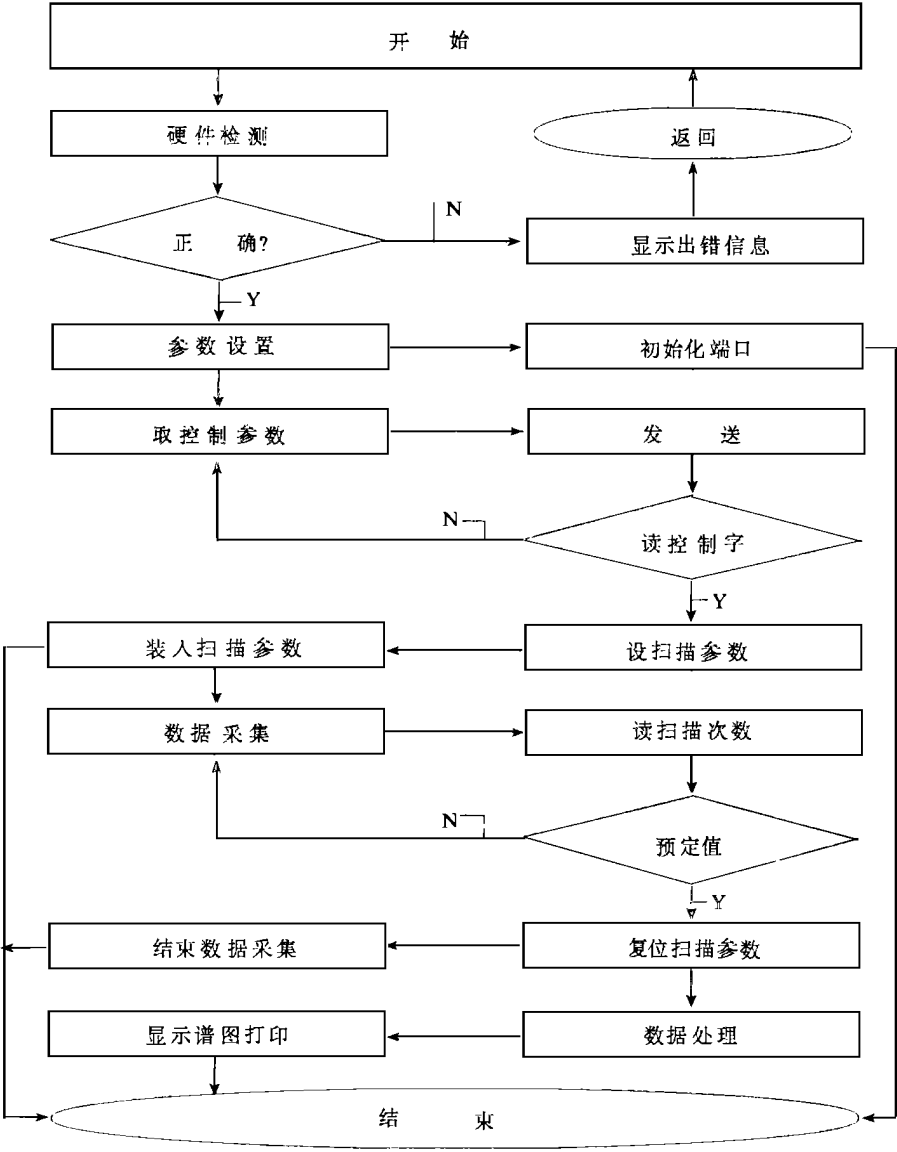


图 4 程序流程图

Fig. 4 The flow chart of the promage

采集接口和干涉仪的检测，确定仪器工作是否正常。对干涉仪的检测包括气体压力、温度、信

号溢出、A/D 溢出等参数的检测。若正常则转入参数设置, 否则显示出错信息后返回。“参数设置表”有两项功能: 1. 是用扫描次数、采集点数、谱图和背景文件名等参数来初始化采集程序; 2. 是把用户在对话框中设置的各种硬件参数转换为端口命令字, 发送给干涉仪控制逻辑电路。“初始化端口”是对数据采集接口的初始化, 包括控制部分的初始化。“设扫描参数”是根据样品的性质使用不同的采点间隔和重复扫描次数。“数据采集”根据设置好的参数开始采集数据。程序中还定义了一个键盘中断, 用户也可以随时中断采集过程。“结束采集”是当采集结束时复位参数到初值, 将数据“存入指定文件”。“处理数据”是根据指定的方法进行富氏变换计算, 这是红外谱图处理的关键。程序提供了一个干涉图计算子程序, 该程序集富氏变换、相位校正和扯指函数为一体并具有极高的运算速度, 数据文件经该子程序处理, 转换成红外谱图在屏幕上显示, 形成最终谱图文件保存。软件提供充足的后处理子程序对谱图检索、局部处理、多谱图显示、打印等都非常有利。因该软件运行在 WINDOWS 环境下, 为谱图后处理提供了与其它应用软件联用的途径。

5 联机调试

联机调试主要是解决干涉仪的光学校正, 自由扫描和受控扫描、数据传递及谱图矫正等问题。

调整干涉仪的光学系统分两步: 辅助干涉仪、主干涉仪的调整; 红外光源和光学台系统光路的调整。

调整辅助干涉仪的目的是为了校准速度伺服控制, 辅助干涉仪产生激光同步信号和白光定位信号。激光信号经整形倍频在伺服环内作为误差信号, 当某种原因使速度变化或调制后的激光频率变化被检测到时, 伺服控制将自动跟踪调整以修正速度变化使动镜稳定匀速运动。白光干涉的主峰被整形而成单脉冲, 作为定位信号, 使重复扫描时干涉信号能够重合。整形电路可对白光干涉主峰两侧的次高峰进行选择, 以平移动镜的定位点, 而对稳定速度起调节作用。定位脉冲信号的下沿到回扫脉冲的上沿, 激光信号是稳定的。回扫脉冲的上沿使动镜速度迅速为零换向返回, 到达起始端刹车脉冲使速度再次为零, 而后重新开始下一周期扫描。

因主干涉仪的光源是红外光, 校准光路需采用可见光替代红外光源, 我们校准时采用的是红色激光, 这比采用白炽灯或其它可见光源静态校正干涉环的方法要好, 又可动态校正光学系统的准直度。入射单光束通过光学系统到达检测器时, 调整各反射镜使光路准直。入射光经分束器、动镜、定镜射出后, 调整定镜使中心光斑最亮, 并且经反射镜到达样品支架时不分散, 而使出射光成为满足相干条件的平行光。转换红外光源到光学系统, 用示波器从检测器输出端观察主光路的干涉峰的形状和峰高, 仔细微调定镜和光源位置, 使干涉峰最大, 调整即完成。这种方法, 在系统动态运行时一次即可调准光路。

自由扫描的前扫和回扫脉冲宽度由速度伺服电路参数确定。

在对样品扫描时, 随采样点数、采点间隔的不同, 干涉仪前扫距离也随着变化, 因此需要在计算机控制下调整扫描速度。前扫速度的稳定取决于激光的频率, 由于激光器的频率非常稳定, 前扫误差可以忽略, 关键是回扫和刹车脉冲的宽度, 如果回扫过快, 在惯性作用下会使动镜抖动, 刹车脉冲过窄, 影响零制动位位置和换向时序, 对重复扫描产生影响, 使干涉数据不能重合。适当地调整回扫和刹车脉冲宽, 及调整软件执行程序, 以缩短指令执行周期, 即

可使速度稳定。

信号通道的校正包括前置放大器、程控滤波器、程控后制放大器、采样保持器和 A/D 转换器等调整。调整这些电路的零基线和电路的噪声容限,可使通道带宽满足信号带宽,另外由程序根据采样的需要可进行不同的选择。精确调整采样保持器的扑捉时间和 A/D 转换器的零位,使 A/D 对输入的±10V 信号能满程转换。

A/D 转换的输出是 16 位二进制补码,在高速数据采集板内完成对 32 位的变换。采集板的调整是使 A/D 结束信号准确分解,调整读写脉冲宽度,在规定的时间内完成读写过程,正确发出 BUSY 信号,结束时复位 BUSY 信号(参看数据采集部分和时序图)。数据处理全部由软件进行,主要是调整富里叶变换参数,及校准峰位,参看软件设计部分和调试流程图 5。

6 结果和讨论

仪器调试成功后,我们进行了标准样品检测。样品:聚苯乙烯标准样。光源:陶磁中红外光源。检测器:TGS 检测器。扫描次数:16 次。光路:内光路。增益:1。

聚苯乙烯标准样品在中红外区的红外谱图见图 6。通过对整机的综合分析,该机的光学系统达到原设计指标,计算机接口设计满足要求,干涉仪控制运行稳定,软件编制成功。整机

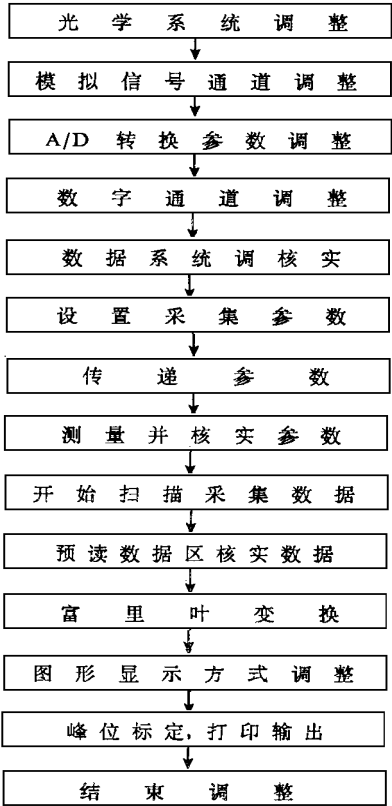


图 5 调试流程
Fig. 5 The flow chart of the adjustment

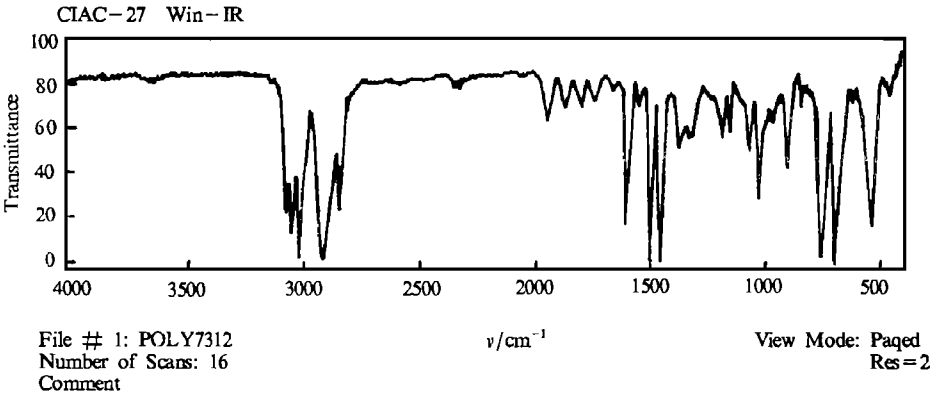


图 6 聚苯乙烯标准样品
Fig. 2 The spectrum of the standard sample polystyrene

操作方便, 输出谱图准确, 满足科研要求。经鉴定该机已达到 FTIR 光谱仪 90 年代同期同类仪器的技术水平, 成功地完成了改造工作并达到了预期目标。

Reformation of the Data System of the FTS- 20E Fourier Transform Infrared Spectrophotometer

Zhu Wenbin Zhou Mi Zhong Caiyuan Zhou hong Xi Shiquan
(Changchun Institute of Applied Chemistry, the
Chinese Academy of Sciences Changchun 130022)

Abstract Reported the reformation job of data system of the FTS- 20E Fourier Infrared Spectrometer. It replaces the old NOVA4 data system with a new interface and IBM 486 computer. Described the details of the hardware design and the edition of the software. The data system reformation not only saves the FTS- 20E Fourier Infrared Spectrometer, but also makes the spectrometer getting up to the new level of the nineties.

Key words fourier transform infrared spectrometer data system machelson interferometer

Classifying number 0657. 33