

УДК 621.385

В. В. Каичев, А. М. Сорокин, В. А. Боронин, А. М. Бадалян

*(Барнаул — Новосибирск)***РАЗВИТИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ
ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ: АППАРАТНО-ПРОГРАММНЫЙ
КОМПЛЕКС СКАНИРУЮЩЕЙ СПЕКТРОСКОПИИ**

Описан аппаратно-программный комплекс, предназначенный для автоматизации эксперимента по спектральному исследованию в реальном масштабе времени физико-химических процессов, происходящих на твердой поверхности. Предложены принципы и алгоритмы управления сканирующей спектральной аппаратурой и накопления экспериментальных данных. Продемонстрированы качественно новые возможности автоматизированного экспериментального оборудования.

Современные экспериментальные исследования поверхности твердого тела в силу сложности и многоплановости происходящих на ней физико-химических явлений, как правило, требуют непрерывного аппаратного контроля состояния поверхности и окружающей газовой фазы одновременно несколькими аналитическими методами. Ясно, что данная задача наиболее эффективно решается с использованием программных и аппаратных средств автоматизации, способных обеспечить параллельное управление работой входящих в состав аналитического комплекса приборов, сбор данных, их обработку и усвоение в реальном масштабе времени. Частично потребности эксперимента в настоящее время удовлетворяются появившимися на мировом рынке новыми автоматизированными аналитическими системами [1, 2], использование которых, однако, не всегда оказывается оправданным. Так, применяемые для реализации многозадачного режима работы мощные вычислительные средства (например, Sun-system workstation с операционной системой UNIX [1]) делают стоимость аналитических систем непомерно высокой, а оснащение IBM-совместимого персонального компьютера набором соответствующих интерфейсных устройств [2] приводит к монополизации ресурсов этого компьютера прикладными управляющими программами, что неудобно при проведении длительных рутинных экспериментов. Указанные обстоятельства, а также накопленный многочисленный парк отдельных неавтоматизированных датчиков и приборов в отечественных лабораториях стимулируют исследователей к разработке собственных информационно-измерительных систем (см., например, [3]).

В связи с этим сформулируем наиболее общие, на наш взгляд, требования к подобным системам:

- параллельное обслуживание нескольких приборов, разнообразных датчиков и исполнительных устройств, сбор данных, их обработка и визуализация контролируемых параметров в реальном масштабе времени (от 10^{-3} до 10^4 с);
- возможность оперативного управления ходом эксперимента по каждому регистрируемому параметру, синхронизация используемых методов анализа;
- гибкость и наращивание программных и аппаратных средств в целях расширения приборного парка без коренных изменений в системе;

— наличие в составе комплекса IBM-совместимого персонального компьютера (PC) для привлечения широкого класса программ обработки экспериментальных данных.

Оптимальным решением, удовлетворяющим перечисленным требованиям, является, по нашему мнению, построение двухуровневого иерархического комплекса «PC — микроконтроллер», где задачи реального времени по управлению и сбору данных возложены на подчиненный процессор, тем самым высвобождаются ресурсы PC для обработки информации или решения других задач [4].

С другой стороны, большинство аналитических методов, используемых в настоящее время для контроля физических свойств и химического состава поверхности — термодесорбционная масс-спектрометрия (ТДС), УФ-, рентгенфотозлектронная и оже-спектроскопия (УФС, РФЭС, ОЭС), спектрометрия характеристических потерь энергии медленных электронов (СХПЭЭ) и т. д., являются «сканирующими», т. е. работающими по принципу развертки информационного сигнала по какому-либо изменяющемуся во времени параметру. Данное обстоятельство позволяет во многом унифицировать программную поддержку управления приборами, передавая при этом функции синхронизации задач, сбора данных и передачи их в PC многозадачной операционной системе реального времени.

Такой подход реализован в созданном нами специализированном аппаратно-программном комплексе для автоматизации эксперимента на сверхвысоковакуумной спектральной установке ADES-400 (фирма VG Scientific, Англия). Установка предназначена для исследований физико-химических свойств поверхности твердого тела и укомплектована целым рядом сканирующих аналитических приборов (рис. 1): стандартными спектрометрами СХПЭЭ, УФЭС

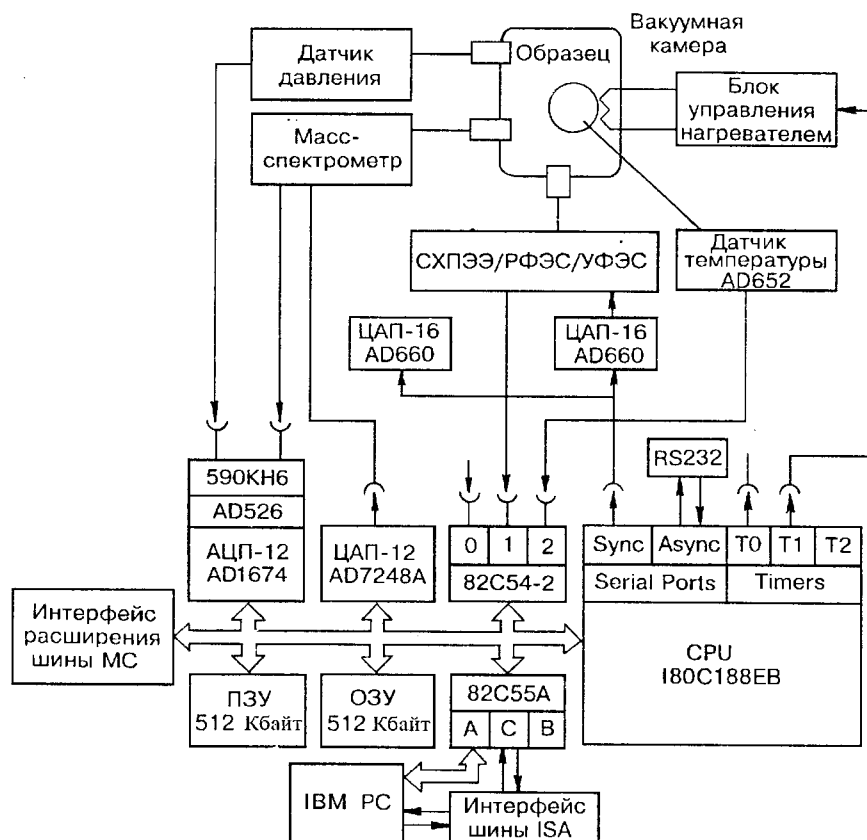


Рис. 1

и РФЭС, масс-спектрометром, а также разработанным нами [5] терморегулятором для управления температурой образца по заданному закону. В ходе эксперимента требовалось анализировать давление и изменение состава газовой фазы в сверхвысоковакуумном объеме по 16 массам при развертке температуры образца в диапазоне 100 ÷ 1200 К и одновременном контроле состояния поверхности образца методами УФЭС или РФЭС. Разработанное нами оборудование представляет собой аппаратно-программный комплекс, реализованный в виде распределенной системы на базе IBM-совместимого персонального компьютера и интеллектуального микроконтроллера (МС) на базе Intel 80C188EB, оснащенного набором интерфейсных модулей. Выбор данного микропроцессора определяется его функциональной законченностью, развитой архитектурой встроенных каналов ввода/вывода, а также полной совместимостью системы команд с инструментальным компьютером, что облегчает создание прикладного матобеспечения [6]. Помимо микропроцессора, МС содержит ПЗУ емкостью до 512 Кбайт, статическое ОЗУ емкостью до 512 Кбайт, программируемый таймер (82C54A), программируемый параллельный интерфейс (82C55A), синхронный последовательный порт для связи с периферийными устройствами (стандарт SPI), восьмиканальную систему сбора данных (мультиплексор 590KN6, программируемый усилитель AD526, 12-разрядный аналого-цифровой преобразователь AD1674), цифроаналоговый преобразователь (AD7248A) и интерфейс расширения внутренней магистрали для подключения дополнительных устройств. Обмен информацией между процессорами комплекса осуществляется через двунаправленный 8-разрядный параллельный канал (порт А микросхемы 82C55A), причем передача данных из МС в РС производится в режиме прямого доступа к памяти под управлением контроллера DMA, входящего в состав РС. Конструктивно контроллер выполнен на печатной плате размерами 180 × 110 мм и устанавливается в персональном компьютере через разъем системной шины стандарта ISA. Для работы контроллера требуется одно напряжение питания +5 В. Потребляемая мощность — не более 3 Вт.

Гальванически развязанные от МС дополнительные интерфейсные модули встроены нами в конструктив комплекса ADES-400 и осуществляют управление разверткой абсциссы приборов СХПЭЭ и РФЭС (16-разрядные цифроаналоговые преобразователи на базе AD660), прецизионное измерение и управление температурой объекта (блок регистрации температуры на основе преобразователя напряжение—частота AD652 и тиристорный блок управления нагревателем).

Математическое обеспечение комплекса (рис.2) имеет четыре уровня:

I. Пакет прикладных исполнительных программ (задач), осуществляющих управление приборами и сбор данных от них (локализован в МС).

II. Ядро многозадачной операционной системы реального времени, обеспечивающее запуск задач и управление ими в процессе работы (передачу

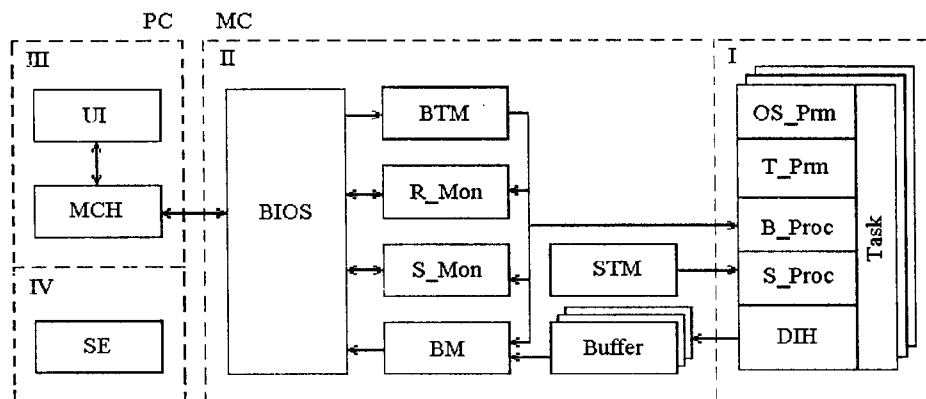


Рис. 2

параметров эксперимента, режима работы и т. д.), распределение ресурсов микроконтроллера между задачами, управление потоками данных между процессорами (МС).

III. Интерфейс пользователя, осуществляющий связь оператора комплекса с прикладными задачами через соответствующий системный драйвер устройства, а также визуализацию регистрируемых данных в графическом и символьном представлении на экране монитора (РС).

IV. Пакет программ обработки экспериментальных данных (РС).

Последние два уровня реализованы для работы РС в операционных системах MS DOS, Windows 95 и Windows NT.

Специфической особенностью описываемого комплекса является наличие в структуре его матобеспечения оригинальной многозадачной операционной среды реального времени, специально разработанной для указанного класса задач с учетом архитектуры аппаратных средств используемого микропроцессорного устройства. Эта система названа нами «Тренд».

Действительно, единство алгоритма управления для всех составляющих инструментальный комплекс приборов, а именно «сканирование» информационного сигнала по параметру развертки, позволяет упростить логику механизма переключения задач введением в структуру операционной среды специального модуля Sync_Task_Manager (STM), отвечающего за синхронизацию запуска процедур реального времени. Работа STM инициируется по прерыванию внутреннего таймера процессора МС (T2) в соответствии с программно-задаваемым интервалом системного времени (0,1—10 мс).

На этапе конфигурирования программной среды для проведения конкретного эксперимента пользователем формируется очередь процессов, последовательно вызываемых STM в соответствии с их приоритетом (максимальное количество элементов очереди 16). Элементы очереди создаются при загрузке прикладных задач системным монитором (S_Mon) и хранятся в фиксированной области данных STM в виде списка вызываемых процедур. Данный список содержит системную информацию для каждой задачи: адрес «синхронной» процедуры, идентификатор процесса, состояние процесса, периодичность вызова.

Загруженный в оперативную память МС процесс может находиться в трех состояниях: АКТИВЕН, НЕАКТИВЕН и ОЖИДАНИЕ (внешнего события или сообщения от другого процесса). Перевод в активное состояние осуществляется либо по команде системного монитора (из состояния НЕАКТИВЕН), либо через соответствующий запрос другого процесса или обработчика асинхронного аппаратного прерывания внешнего события (из состояния ОЖИДАНИЕ). Активные процессы получают управление от STM.

Получив управление, «синхронная» процедура активного процесса (S_Proc) устанавливает необходимое значение параметра развертки соответствующего прибора, производит требуемые действия по запуску средств регистрации его информационного сигнала (АЦП, счетчик-таймер и т. д.) и возвращает управление STM. Кроме того, эти процедуры могут вводить оцифрованное значение сигнала в закрепленный за задачей кольцевой буфер данных. В некоторых случаях функция ввода данных обеспечивается обработчиками асинхронных прерываний Device Interrupt Handler (DIH) по запросам от аппаратуры. Отметим, что прерывание системного таймера имеет максимальный приоритет.

Освобождение буферов данных производится модулем Buffer_Manager (BM). Передача накопленной информации в РС осуществляется в виде связанного списка сообщений, состоящих из заголовка (имя процесса, идентификатор сообщения, длина сообщения) и собственно данных. Размер сообщений для каждого процесса регламентируется в системной таблице, хранящейся в области данных BM и содержащей другую необходимую информацию: адреса буферов, их размеры, указатели «головы» и «хвоста», флаги запросов на обработку. Данная таблица также формируется при загрузке прикладных программ аналогично таблице STM, причем размеры буферов для каждой задачи определяются пользователем исходя из потока данных и наличия непрерыв-

ного пула свободной оперативной памяти МС. Работа ВМ, как и других системных средств, производится в фоновом (по отношению к задачам реального времени) режиме.

Резидентный монитор (R_Mon), располагаемый в постоянной памяти МС, обеспечивает начальную инициализацию аппаратуры контроллера после включения питания, инициализацию базовой системы ввода/вывода (BIOS), загрузку и запуск операционной системы из РС. R_Mon поддерживает выполнение следующих команд:

ReadMem(address, size) — передать в РС содержимое памяти;
WriteMem(address, size, data) — записать данные в память МС;
ReadPort(address) — передать в РС содержимое порта;
WritePort(address, data) — записать в порт данные;
JumpTo(address) — передать управление по адресу.

Формат сообщений-команд и сообщений-реплик аналогичен формату сообщений-данных, но в качестве данных передаются параметры команды или реплики.

Аналогично системный монитор S_Mon, отвечающий за загрузку и запуск прикладных программ, а также управление ими в процессе работы комплекса, выполняет следующие команды:

LoadTask(TaskID, address, size) — загрузить задачу;
UnloadTask(TaskID) — «выгрузить» задачу;
SetTaskRegim(TaskID, Regim) — установить режим работы задачи;
SetTaskParamTable(TaskID, ParamTbl) — установить параметры .

Отметим, что после загрузки и запуска ядра операционной системы «Тренд» резидентный монитор интегрируется в ее среду и его команды остаются доступными пользователю.

Диспетчеризацию и планирование работы ядра операционной системы осуществляет планировщик фоновых задач Background_Task_Manager (BTM). В его функции входит проверка запросов к модулям операционной среды и передача управления им в свободное от прикладных задач время. Кроме того, BTM предоставляет свободное процессорное время «фоновым» процедурам прикладных задач для выполнения различных действий (например, процедуре расчета подводимой мощности цифрового терморегулятора). Приоритеты в порядке убывания присвоены следующим образом: фоновые процедуры прикладных задач (B_Proc), R_Mon, S_Mon, ВМ. Связь BTM с задачами и модулями операционной среды также осуществляется через соответствующую системную таблицу.

Работающие в среде «Тренд» прикладные задачи (Task) по своему функциональному назначению во многом соответствуют драйверам периферийных устройств любой другой операционной системы. Действительно, каждая задача, общаясь с системой через механизм запросов, обеспечивает работу соответствующего прибора и метода измерения. Вследствие этого структура прикладной задачи напоминает структуру драйвера и содержит следующие программные блоки:

1. Фиксированная область связи с операционной средой (OS_Prm), которая включает в себя указатели на процедуры и их атрибуты.

2. Таблица внутренних параметров задачи (T_Prm) — режим и параметры работы прибора: начальное и конечное значение развертки, шаг, скорость и т. п. Прикладные задачи могут выполняться в нескольких режимах, например: а) регистрация масс-спектрометром обзорного спектра или контроль за эволюцией нескольких (до 16) фиксированных значений масс; б) линейный нагрев, остывание образца или изотермическая стабилизация. При необходимости пользователь имеет возможность управлять режимом и параметрами задач в процессе работы посредством команд системного монитора.

3. Необязательная синхронная процедура S_Proc для работы под управлением STM.

4. Необязательная фоновая процедура V_Proc для работы под управлением ВТМ.

5. Необязательные обработчики асинхронных прерываний Device Interrupt Handlers (DIH).

Доступ к сервисным функциям операционной среды «Тренд» и прикладным задачам обеспечивает интерфейс пользователя (User's Interface, UI), который позволяет настраивать комплекс для проведения конкретных экспериментов и изменять конфигурацию в процессе работы. Дополнительный сервис UI по связи с задачами заключается в возможности просмотра накопленной в буферах данных МС информации в графическом виде и индикации наиболее важных параметров процессов на экране монитора в масштабе реального времени.

Исполнительный пакет для исследования свойств поверхности на сверхвысоковакуумном комплексе ADES-400 содержит по числу регистрируемых параметров пять прикладных задач: MS, LEELS, XPS, Thermo, Pressure. Заметим, что в силу своей специфики не все входящие в комплекс приборы могут работать одновременно. При конфигурировании и работе системы интерфейс пользователя отслеживает сопрягаемость активных задач, индицируя на экране монитора соответствующие предупреждения.

Программный модуль, отвечающий в РС за обмен сообщениями между UI и матобеспечением подчиненного процессора, реализован в виде системного драйвера устройства MC_Handler (MCH). Драйвер аналогично модулю BIOS системы «Тренд» обеспечивает передачу «отложенных» сообщений, используя аппаратное прерывание передатчика канала связи. Поскольку прием информации из МС осуществляется в режиме прямого доступа к памяти персонального компьютера, в функции драйвера входит обслуживание прерывания End_Of_Process используемого канала контроллера DMA при заполнении выделенной страницы оперативной памяти (обычно 64 Кбайт). Дальнейшая обработка принимаемой информации заключается в ее сортировке на сообщения-реплики и сообщения-данные с последующей переадресацией их соответствующим процедурам интерфейса пользователя.

Накопленная информация хранится в виде файлов текстового или бинарного формата. Программа Spectra Editor (SE) предоставляет пользователю необходимый сервис по просмотру и математической обработке регистрируемых временных и спектральных зависимостей в многооконном режиме. Она обеспечивает следующие функции:

- ручное и автоматическое масштабирование графиков;
- сглаживание и линеаризация кривых;
- элементарные математические операции с массивами данных;
- интегрирование и дифференцирование спектров;
- анализ спектральных данных (определение параметров спектральных линий);
- аппроксимация и интерполяция экспериментальных зависимостей (МНК);
- спектральный анализ (разложение в ряд Фурье);
- создание отчетности в виде графиков и таблиц с выводом на принтер или в файл формата BMP;
- конвертирование данных в форматы Exell и Microcal Origin.

Экспериментальная апробация созданного комплекса в многозадачном режиме показала, что его применение позволяет не только увеличить производительность экспериментальных исследований, но и получить качественно новые данные о физико-химических явлениях на поверхности твердого тела. Ярким примером этому может служить недавно обнаруженный с помощью созданной нами аппаратуры кинетический изотопный эффект в реакции на поверхности платины соадсорбированных слоев окислов азота и углерода [7]. В эксперименте методом термопрограммированной реакции (ТПР) изучался процесс десорбции газообразных продуктов при быстром линейном изменении

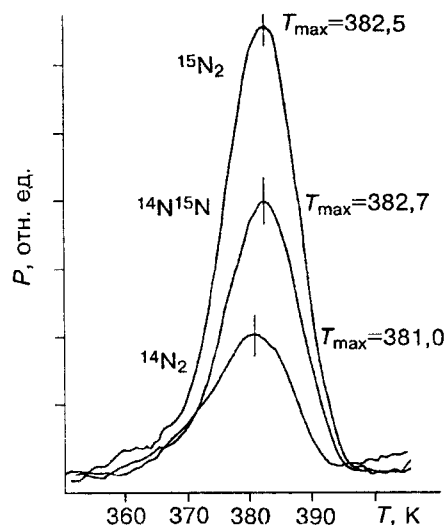


Рис. 3

температуры твердой поверхности. Если в качестве одного из исходных реагентов — окиси азота — использовалась изотопная смесь $^{15}\text{NO} + ^{14}\text{NO}$, то в продуктах реакции обнаруживается азот также в различных составах: $^{15}\text{N}_2$, $^{15}\text{N}^{14}\text{N}$, $^{14}\text{N}_2$. В выбранных условиях процесс характеризуется экстремально узкими, с шириной от 2 до 15 К, ТПР-пиками (так называемый «поверхностный взрыв» [8]). Наша система сбора данных имеет минимальный период дискретизации измерения температуры 20 мс, что при максимальной скорости нагрева 10 К/с, используемой в описанном эксперименте, соответствует шагу по температуре 0,2 К. Эта точность оказалась достаточной для надежного обнаружения относительного сдвига ТПР-пиков азота с различным изотопным составом (рис. 3): $T_{\max}(^{14}\text{N}_2) < T_{\max}(^{14}\text{N}^{15}\text{N}) \sim T_{\max}(^{15}\text{N}_2)$.

Авторы выражают благодарность Д. Ю. Землянову и М. Ю. Смирнову за любезно предоставленные спектральные данные, полученные с помощью нашей системы, а также за внимание и помощь в работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ESCA, AUGER, SIMS. Product Guide: VG Scientific, 1993.
2. ESCA 310. Technical Description: Scienta Instruments AB, 1993.
3. Денисов В. П., Егоров Н. В., Овсянников А. М. и др. Универсальный автоматизированный комплекс для элементного и структурного анализа поверхности // ПТЭ. 1995. № 3. С. 205.
4. Бадалян А. М., Гаун Д. Д., Каичев В. В. Автоматизированный оптический спектрофотометр со сканирующим дисперсионным элементом // Приборы и системы управления. 1994. № 10. С. 31.
5. Каичев В. В., Сорокин А. М., Бадалян А. М. и др. Автоматизированная система управления температурой объекта по заданной модели // ПТЭ. 1997. № 4. С. 135.
6. Intel 80186EB/188EB: User's Guide, 1994.
7. Zemlyanov D. Yu., Smirnov M. Yu., Gorodetskii V. V., Vovk E. I. Kinetic isotope effect in the reaction of NOads and COads on the Pt(100) surface // Catal. Lett. 1997. 46. P. 201.
8. Lesley M. V., Schmidt L. D. The NO + CO reaction on Pt(100) // Surf. Sci. 1985. 155, N 1. P. 215.

Поступила в редакцию 7 апреля 1997 г.