

## INTERFACE ENTRE UM ESPECTRÔMETRO PARA O ULTRAVIOLETA DE VÁCUO E UM MICROCOMPUTADOR PESSOAL

Gerardo Gerson Bezerra de Souza, Frederico Celestino Pontes, Milton Roedel Salles e Haroldo Gamal

*Instituto de Química – UFRJ – Cidade Universitária, Ilha do Fundão; 21.910 – Rio de Janeiro (RJ).*

Recebido em 3/2/88

### ABSTRACT

#### INTERFACING A VACUUM ULTRAVIOLET SPECTROMETER TO A PERSONAL COMPUTER

A previously described vacuum ultraviolet spectrometer, based on the electron energy-loss technique, has been interfaced to an 8-bit microcomputer. Three basic experimental parameters are controlled: the high-voltage output from a digitally programmable power supply, the number of counts from an electron detector, and the pressure inside the vacuum chamber. Three FORTRAN programs (including some assembly subroutines) have been developed, for data acquisition and treatment.

### RESUMO

Desenvolveu-se uma interface entre um microcomputador pessoal de 8 bits (UNITRON AP-II) e um espectrômetro para a região do ultravioleta de vácuo, construído no Instituto de Química da UFRJ e baseado na técnica de impacto de elétrons. A interface visa basicamente o controle programável da saída de uma fonte de alta tensão, da pressão mantida no interior de uma câmara de vácuo e a medida e armazenamento de contagens de pulsos resultantes da detecção de elétrons através de um multiplicador de elétrons. Trata-se de um sistema eficiente e de baixo custo, que poderia ser utilizado em outras montagens experimentais. Foram desenvolvidos também 3 programas em FORTRAN: um para a aquisição dos espectros via a interface desenvolvida, outro para a impressão de gráficos em impressoras gráficas, e um terceiro para tratamento dos dados adquiridos.

### I – INTRODUÇÃO

Na região do Ultravioleta de Vácuo pode ser observada a grande maioria das transições eletrônicas de átomos e moléculas, partindo do estado eletrônico fundamental. Assim, todos os gases atmosféricos e um grande número de compostos orgânicos e inorgânicos (etano, etileno, dióxido de carbono, benzeno, etc) apresentam suas principais transições eletrônicas em energias superiores a 5 eV (comprimentos de onda inferiores a 250 angstroms)<sup>1</sup>.

Um espectrômetro para a região do ultravioleta de vácuo foi desenvolvido no Instituto de Química da UFRJ,

baseado na técnica do impacto de elétrons. O aparelho, já descrito anteriormente<sup>2</sup> e mostrado esquematicamente na figura 1, consiste basicamente de uma câmara de vácuo (pressão de fundo,  $1 \times 10^{-6}$  torr), no interior da qual faz-se colidir, a  $90^\circ$ , um feixe de elétrons e um feixe atômico ou molecular (amostra).

Após a colisão os elétrons são, para cada ângulo de espalhamento, analisados em energia e detetados.

O princípio da técnica consiste em que, por conservação de energia, a energia perdida (ou transferida) pelos elétrons incidentes deve ser absorvida pela amostra e assim a análise das perdas de energia dos elétrons equivale ao estudo dos processos de excitação das amostras. No espectrômetro do Instituto de Química da UFRJ, o feixe de elétrons possui uma energia variável entre 0,5 e 3,0 keV; para análise da energia dos elétrons espalhados utiliza-se um analisador eletrostático do tipo Mollenstedt<sup>3</sup> e os elétrons são detetados através de um multiplicador de elétrons (Spiraltron, Galileo Electro-Optics).

Este arranjo possibilita a obtenção de espectros de excitação eletrônica na faixa de energia de 1 a 500 eV (12000 a 25 angstroms, aproximadamente).

Para a obtenção de um espectro, faz-se necessária uma varredura da tensão (C.C.) aplicada aos eletrodos centrais do analisador de energia; para cada valor da tensão registra-se então a contagem de pulsos associada aos elétrons espalhados com a energia correspondente à voltagem aplicada, através de uma cadeia pré-amplificador, amplificador e discriminador. No esquema adotado inicialmente para a obtenção de espectros, a varredura da tensão do analisador era feita através de uma fonte programável por uma rampa externa, sendo as contagens obtidas armazenadas na memória de um analisador multicanal (Tracor-Northern, modelo TN1706). Um dos principais problemas associados a este esquema consistia na dificuldade de obtenção automática de um mesmo espectro repetidas vezes. Este procedimento é essencial quando se trabalha com sinais de muito baixa intensidade; é um fato conhecido que a acumulação de um espectro N vezes melhora a relação sinal/ruído por um fator igual à raiz quadrada de N.

A utilização de um microcomputador para o controle da aquisição de dados estão associadas diversas características importantes, entre as quais:

- simplicidade na obtenção de espectros repetidas vezes através do controle de uma fonte de tensão programável digitalmente;
- possibilidade de armazenagem em memória permanente

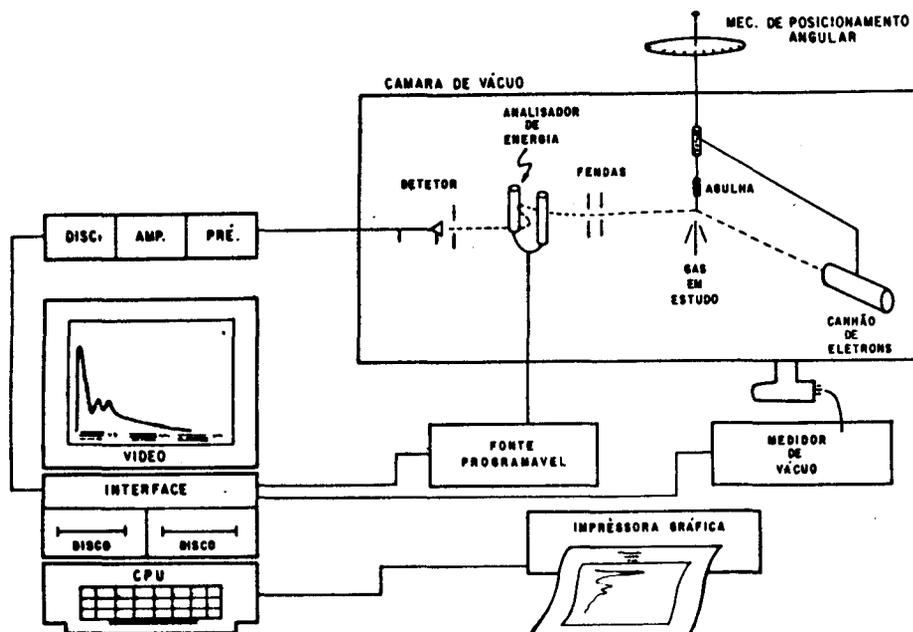


Figura 1. Diagrama simplificado do espectrômetro de impacto de elétrons desenvolvido no Instituto de Química da UFRJ.

(disquetes) de um dado número de espectros, evitando perda de dados experimentais em caso de falta de luz e possibilitando o arquivamento em forma compacta de um grande número de dados experimentais;

- controle em paralelo de outros parâmetros experimentais (pressão na câmara, vazão da água de resfriamento das bombas de vácuo, temperatura da sala, etc) e a emissão de alarmes quando estes parâmetros afastarem-se de faixas de valores previamente determinadas.

Estas características extremamente vantajosas, aliadas ao baixo custo de um microcomputador e a possibilidade de se poder substituir um equipamento importado de difícil manutenção, levaram-nos a desenvolver uma interface entre nosso espectrômetro e um microcomputador pessoal de 8 bits (Unitron AP-II). Descrevemos a seguir esta interface e os programas associados, exemplificando sua utilização através de espectros de gases estudados com seu emprego.

## II – INTERFACE

### – Descrição dos circuitos

Na figura 2 podemos observar o diagrama esquemático da interface construída, que tem como funções básicas o controle da tensão de alimentação do analisador de velocidades de elétrons, a contagem e armazenamento dos pulsos associados aos elétrons detetados e a medida de pressão mantida no interior da câmara de vácuo durante a aquisição de espectros.

A decodificação de endereços foi realizada a partir de um circuito integrado 74138 com o objetivo de poupar espaço na placa. O sinal R/W foi separado em dois (RDS e

WRS) sincronizados com decodificação parcial oferecida pelo barramento do computador (DS)<sup>4</sup>.

As linhas de dados foram ligadas ao barramento através de um “buffer tri-state” bidirecional (74245) para evitar conflitos de barra e aumentar o “fan-out” da mesma (1 LS TTL).

### – Controle da fonte de alta tensão

A fonte de alta tensão (BERTAN 205-A-01R, 0-1000V, 30 mA) utilizada na alimentação do analisador de velocidades de elétrons possui uma entrada de programação paralela constando de 16 bits de dados mais um de habilitação. A interface para a mesma consiste de um “latch” de 17 bits, formado por circuitos integrados 7475 (4 flip-flops tipo D), nos endereços E091, E092 e E090 (interface colocada no SLOT 1). No endereço E090, colocamos um “latch” de 4 bits, sendo os de número 4 e 5 ligados à 8253 (como veremos adiante) e o de número 6 servindo como habilitação para a fonte. Ainda neste endereço, criamos uma entrada paralela formada por 2 circuitos integrados 74125 para permitir o “pooling” de sinais internos da interface, bem como a leitura de sinais externos (medidor de vácuo).

### – Contagem dos pulsos do discriminador

Os contadores e o temporizador foram implementados usando um circuito integrado 8253 da Intel<sup>5</sup>. Este circuito integrado contém 3 contadores de 16 bits, programáveis, apresentando 6 modos de operação.

No temporizador, utilizamos o contador 2, no modo 0. Como “clock”, usamos o sinal  $\phi 1$ , de aproximadamente 1,038 Mhz (controlado a cristal), dividido por 1000, resul-

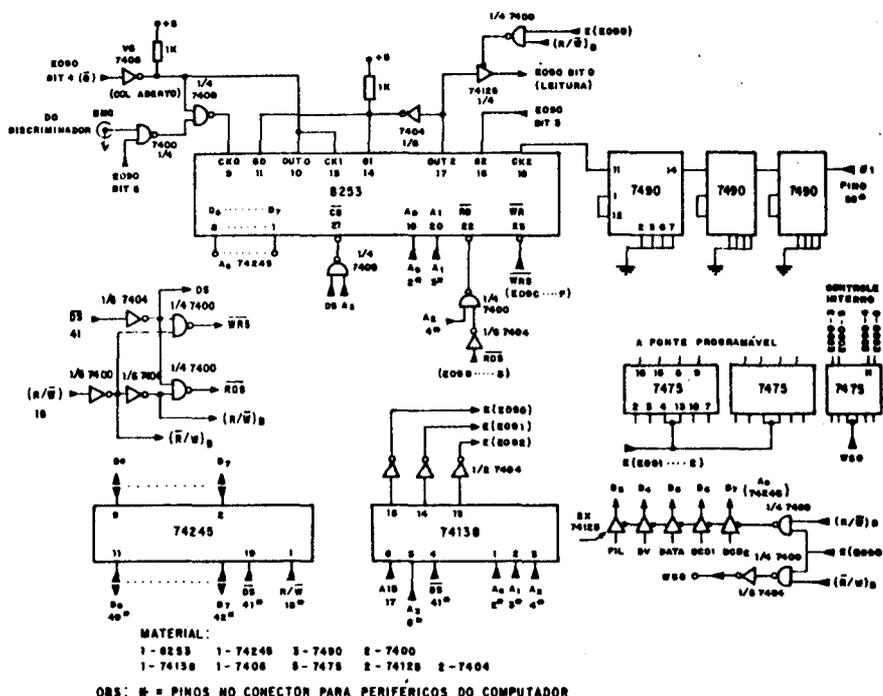


Figura 2. Diagrama esquemático da interface construída.

tando num sinal de 1,0 ms. Desta forma, pode-se obter tempos de contagem desde 1 até  $(2^{16} - 1)$  ms.

A contagem dos tempos inicia-se com liberação do "gate" do contador 2 (BIT 3, E090). Ao fim do tempo programado, os contadores 0 e 1 são inibidos pela saída do temporizados, a qual pode ser controlada pela leitura do BIT 0 da posição E090.

Para o contador, ligamos em série os contadores 0 e 1 do 8253. Isto resulta em uma contagem máxima de  $2^{32}$  pulsos por canal (com frequência máxima de 2,0 Mhz). Certamente este é um número muito elevado para a maior parte dos casos práticos. Por outro lado, se apenas um dos contadores fosse utilizado, correríamos o risco de "estourar" a contagem, especialmente nas fases de ajuste do espectrômetro.

Os contadores do 8253 devem ser reprogramados a cada varredura. A nova programação será considerada válida somente se um pulso for aplicado à entrada de cada contador (este pulso não é contado). Isto obviamente é um problema quando se deseja ligar os contadores em série. Como solução, ligamos um multiplexador às entradas dos contadores 0 e 1, o que permite contar ora os pulsos provenientes do discriminador, ora um pulso de "ativação" gerado por programa (BIT 4 de E090) complementado). Há ainda dois outros problemas envolvendo o uso do 8253, que são específicos do computador utilizado (ou qualquer microcomputador similar ao APPLE II) e do fato de usarmos um segundo processador (Z-80).

O primeiro decorre do fato de que, no computador utilizado, antecedendo a cada escrita, uma leitura é realizada (o pino R/W do processador assume o estado "R" no início de escrita, só passando para o estado "W" pouco após o endereço se tornar válido). Ocorre que a versão uti-

lizada da 8253<sup>5</sup> tem como especificação que o período mínimo entre a aplicação de dois pulsos de controle é de um microssegundo. Para garantir o funcionamento do dispositivo, separamos seu endereçamento em dois grupos: um para leitura e outro para escrita, o que impede a aplicação do sinal de leitura durante um ciclo de escrita.

O segundo problema, é causado pelo fato de que o "clock" do Z-80 se torna assimétrico durante o tempo de "refresh" dos registros internos do 6502. Disto resulta que um endereço pode permanecer na "barra" por dois ciclos do "clock"  $\phi 1$ , do qual depende a geração dos pulsos de leitura e escrita em um endereço. Sendo o 8253 sequencialmente programado (o mesmo endereço servindo a dois registros distintos, reconhecidos pela ordem de chamada), isto impossibilita seu uso com a "placa CP/M" (Z-80), neste modo de operação. A troca de processadores pode ser feita por programação<sup>6</sup>, o que efetivamente fazemos a cada seqüência de programação, eliminado este problema.

Julgamos vantajoso o uso da 8253 ao invés de contadores discretos, principalmente porque o tipo de experimento é lento e o espaço disponível para montagens é pequeno.

— Interface com o medidor de vácuo

O medidor de vácuo que utilizamos é digital (VARIAN 845) e fornece os seguintes sinais:

- a) "status" do filamento - 1 bit;
- b) dado válido - 1 bit (pulsado);
- c) mantissa - 1 bit (pulsado);
- d) expoente - 4 bits (BCD).

Os dados são fornecidos sob a forma de dois dígitos para a mantissa (0,0 a 9,9) e dois para o expoente (-1 a -11). Tanto o expoente quanto a mantissa deve ser lidos durante o espaço de tempo limitado por duas pulsações do sinal "dado válido". A mantissa é representada pelo número de pulsos emitidos na linha do mesmo nome, dividido por dez e o expoente em BCD, usando 4 bits.

A contagem dos pulsos da mantissa e o reconhecimento dos pulsos de validação dos dados, são realizados por programa (a leitura da pressão só é feita ao fim de cada varredura e é opcional). Para ler o expoente, usamos somente dois bits (os de peso 2 e 4) o que permitiu cobrir a faixa de pressão normalmente utilizada ( $10^{-4}$  a  $10^{-7}$  torr), economizando duas linhas do conector e duas portas de entrada. A rotina de leitura da mantissa e do expoente foram escritas em "Assembler" do Z-80, mas a divisão por 10 é realizada pelo programa de aquisição, escrito em FORTRAN.

### III – OS PROGRAMAS

Foram desenvolvidos três conjuntos básicos de programação:

- ADQ – para aquisição de dados
- DATUM – para tratamento de dados
- LAPIS – para impressão de gráficos

O ADQ é formado por três blocos que descrevemos a seguir.

O primeiro bloco, que é o programa principal, permite definir os parâmetros da aquisição bem como dar início à mesma, interrompê-la, ou passar o comando para outros blocos (modo gráfico e de operação em disco). Todos os comandos são especificados em "menus" (opcionalmente mostrados), e constam de uma letra.

Durante uma aquisição de espectro, os dados são continuamente mostrados na tela (normalizados em relação ao ponto de maior intensidade no espectro), ao lado de informações complementares (canal, número de varreduras, intensidades, energia e pressão). Outras possibilidades de visualização são disponíveis em modo gráfico.

Para auxiliar a visualização dos espectros, inclui-se um curso cuja movimentação é feita por meio de um potenciômetro de 10 voltas (100 K, lin, Bourms), ligado à entrada de jogos do computador – PDL-0<sup>4</sup>.

Outras possibilidades importantes do conjunto de programas ADQ são:

- aquisição repetida de espectros, num número de canais variável entre 0 e 512, com tempo de acumulação de contagens por canal variável entre 1 e 9999 ms;
- armazenamento automático do espectro acumulado, em disco, após um número n de varreduras.

Os comandos de disco são os mesmos do CP/M, acrescidos de um que permite operar um arquivo em disco com outro residente na memória (opções =, -, +, /).

Estes programas foram escritos em FORTRAN, com as rotinas de controle em Assembler do Z-80 ou do 6502, conforme a ocasião.

O programa DATUM, escrito em FORTRAN, serve para tratamento de dados. Além dos comandos de modo gráfico e de operação em disco do programa ADQ, são disponíveis os seguintes:

- calibração em energia (eV) da abcissa do espectro;
- normalização do espectro (conversão das intensidades relativas em valores de seção de choque, a partir de dados fornecidos pelo operador) e a geração de um arquivo correspondente);
- multiplicação do espectro por uma constante do tipo real (FORTRAN), gerando um arquivo correspondente;
- correção do espectro quanto à variação do poder de transmissão do analisador de velocidade, gerando um arquivo correspondente;
- eliminação de picos espúrios ("spikes").

O programa LAPIS, finalmente, oferece facilidades para a impressão de espectros. O LAPIS incorpora os comandos gráficos do ADQ, além de permitir a expansão vertical de uma região da curva (multiplicador real). O programa traça automaticamente margens, os eixos (calculando as divisões), permite a colocação de legendas paralelas aos eixos e a impressão com ou sem expansão de uma determinada área da curva. O programa LAPIS foi escrito em FORTRAN, sendo que a rotina de comunicação com a impressora (ELEBRA 8031 – "EMILIA") foi escrita em Assembler do Z-80. Esta comunicação é feita através de uma interface RS-232. O desenho do gráfico é executado utilizando o padrão EPSON de programação das agulhas da impressora. Este padrão foi escolhido por ser o mais universal. Tanto o LAPIS quanto o DATUM exigem uma expansão de memória de 16 Kbytes (perfazendo 64 Kbytes) para seu funcionamento.

É importante frisar que o LAPIS permite um registro gráfico de ótima qualidade, com um emprego tão somente de uma impressora gráfica (isto é, sem a necessidade de um plotador digital).

### IV – APLICAÇÕES

A utilização do sistema apresentado pode ser exemplificada através do espectro de excitação eletrônica do átomo de argônio, mostrado na figura 3. O espectro, medido com uma resolução em energia de 0,5 eV, cobre a região de 11 a 33 eV (1127 a 365 Å, aproximadamente) e apresenta quatro estruturas bem definidas, que podem ser associadas aos seguintes processos dominantes:

I (11,8 eV)	$3s^23p^6$	→	$3p^54s$
II (13,4 eV)	$3s^23p^6$	→	$3p^54p$
III (14,0 eV)	$3s^23p^6$	→	$3p^55s/3d$
IV (20-30 eV)	$3s^23p^6$	→	$3s3p^6np$

Particularmente interessante são a estrutura II, associada

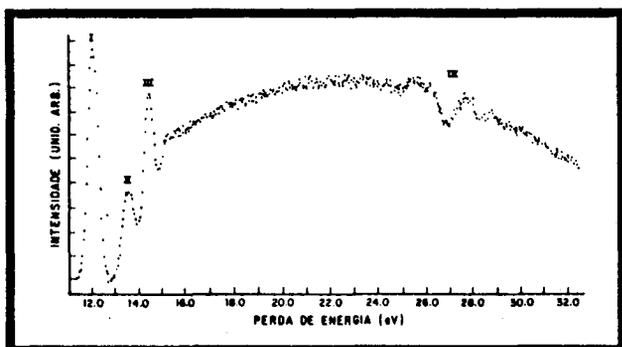


Figura 3. Espectro de excitação eletrônica do átomo de argônio, na faixa de 11 a 33 eV.

a uma transição proibida por regras de seleção dipolares (e que portanto não pode ser vista normalmente em espectrômetros usando fótons como fonte excitante) e a estrutura IV, associada a processos autoionizantes. Maiores detalhes sobre os espectros obtidos para o átomo de argônio podem ser encontrados em outra publicação<sup>7</sup>.

## V – CONCLUSÕES

A interface e os programas descritos no presente artigo possibilitaram um aperfeiçoamento bastante relevante dos procedimentos de obtenção, armazenamento, tratamento e registro gráfico de espectros de ultravioleta de vácuo medidos no Instituto de Química da UFRJ.

## DIVULGAÇÃO

### OURO, METAL INERTE?

Jacinta Enzweiler\* e Inés Joekes\*\*

\* Instituto de Geociências – UNICAMP – Caixa Postal 6152, 13081 Campinas, SP

\*\* Instituto de Química – UNICAMP – Caixa Postal 1170, 13081 Campinas, SP

Recebido em 17/2/88

Nos últimos anos, uma nova corrida do ouro provocou o retorno a questões ainda não resolvidas sobre o comportamento daquele elemento na superfície da terra. Apesar de ser considerado um metal inerte, há evidências de que sob certas condições, o ouro pode ser solubilizado e, uma vez em solução, ser transportado e redepositado em ambientes cujas condições físico-químicas ( $E_h^*$ , pH, força iônica) não sejam mais favoráveis à solubilização. A reprecipita-

A estrutura flexível desta interface permite não apenas sua ampliação (por exemplo para incluir o controle e medida de outros parâmetros, através do emprego adequado de conversões analógico-digital e digital-analógica), bem como a sua utilização em outros dispositivos experimentais.

## VI – AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FINEP pelo apoio financeiro. GGBS e FCP agradecem ao CNPq pela concessão de uma bolsa de pesquisa e apoio técnico, respectivamente.

## VII – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 Melvin, B. Robin; "Higher Excited States of Polyatomic Molecules" – Academic Press, Inc., N. York (1985), vol. III.
- 2 Souza, G.G.B. de; Souza, A.C. de A.; *J. Phys. E: Scient. Instrum.*, (1985) 18, 1037.
- 3 Peixoto, E.M.A.; Souza, G.G.B.; Santos, M.C.A.; *Optik* (1979) 53, 405.
- 4 Gayler, W.D.; "The Apple II Circuit Description", H. SAMS, 1983.
- 5 *Component Data Catalog*, INTEL, pg. 8-59, 1981.
- 6 Softcard "Z-80" Manual MICROSOFT.
- 7 Bielschowsky, C.E.; Souza, G.G.B.; Roberty, H.M.B.; Lucas, C.A.; *Physical Review A* (aceito para publicação).

ção do metal dá origem às ocorrências conhecidas como depósitos secundários formados por concentração química. Estes se distinguem dos depósitos aluvionares, também secundários, porém resultantes de concentração mecânica. O ouro secundário resultante de processos de dissolução e reprecipitação superficiais geralmente é de elevada pureza (podendo chegar a 95%)<sup>1</sup>, contrastando com o ouro primário e aluvionar que costuma conter proporções variáveis de outros elementos como Ag, Cu, Pt, Pd, Al, Fe, Bi, Sn, Pb e Zn. Além disso, em depósitos primários, compostos como a aurostibita ( $Au_2Sb_3$ ), fischerita ( $Ag_3AuSe_2$ ), silvanita ( $AgAuTe_4$ ) e calaverita ( $AuTe_2$ ) e certos sulfetos como a pirita, ( $FeS_2$ ), podem conter quantidades apreciá-

\*  $E_h$ : Potencial de oxidação-redução, definido por:

$$E_h = E^\ominus + \frac{Rt}{nF} \ln Q; \quad E^\ominus = \frac{\Delta G^\ominus}{nF}$$