

文章编号: 0254-5357(1999)04-0303-05

通用 X 射线衍射仪微机改造系统

修连存, 黄俊杰, 俞正奎
(南京地质矿产研究所, 南京 210016)

摘要: 详细分析了 X 射线衍射仪结构, 介绍了改造此类仪器的方法, 包括计算机接口设计和软件编程、安装等。整个展示系统的设计充分考虑了系统的安全性和操作的方便性。

关键词: X 射线衍射仪; 计算机改造; 软件; 接口

中图分类号: O652.9 **文献标识码:** B

1 概述

70 年代以来, 我国先后从日本的理学、德国的西门子、荷兰飞利浦等公司引进了 1 000 多台 X 射线衍射仪, 这些仪器为我国科学技术的发展做出了贡献。但随着时间的推移, 这些仪器已不适应现代化发展的需要, 必须进行技术改造。九五期间, 国家科技部把仪器改造作为重点攻关项目。根据调研结果, 本所选择了 X 射线衍射仪计算机改造项目。

以日本理学公司产品为例, 70 年代的 X 射线衍射仪无计算机控制, 只能通过手工操作, 用记录仪作图形曲线, 根据记录纸上的小格计算 d 值, 然后用尺子测量, 进行数据处理。在 90 年代的今天, 这种数据处理方法显然是落后的。其典型仪器有 2038 及 3015 型。

80 年代以后, 日本理学公司先后推出 D/MAX-A、B 和 C 型机。这类仪器的特点是引进了微机技术: A 型机采用了单片机技术, B 型和 C 型机采用了卡西欧计算机和单片机组成二次计算机控制。其缺点是数据不能在 PC 及其兼容机上处理, 没有通用性; 另外微机维修困难, 且维修价格昂贵, 用户在经济上无法承担。仪器一旦出现故障就被迫闲置, 造成大量浪费。

由于上述原因, 80 年代中期, 国内有许多用户, 开始进行仪器改造, 如中山大学、南开大学和清华大学等, 这些仪器改造只限于联机, 即在原有微机的基础上用 PC 机接收数据, 然后进行数据处理, 但这种

方法不能根本解决维修问题。因此, 国内用户一致呼吁: 舍弃其原有计算机系统, 设计通用接口, 使不同厂家不同系列的仪器能够得到彻底的升级改造。

本项目率先攻克这一难关。这一成果通过部级鉴定后, 获得了国家科技部的大力支持, 在全国范围内得到推广和应用。

2 X 射线衍射仪结构分析^[1]

不同厂家和各种系列的 X 射线衍射仪, 其绝大部分仪器的结构都是相同或相近的, 如图 1 所示。

从图 1 可以看出, 第一类改造的联机方案是通过 RS 232 口与 PC 机相连, 它可以将数据直接传入微机并能控制仪器, 这一技术已得到广泛应用。但此类改造方案不能彻底地解决维修问题, 因为仪器控制和数据传输仍然靠单片机完成。于是本课题提出了第二类改造方案, 这一方案彻底地舍弃了原单片机和卡西欧计算机, 建立了独立的控制系统。实现这一方案的难度很大, 但已获得了成功。

3 计算机接口设计^[2]

微机接口是实现计算机和仪器之间相互通讯的桥梁, 因此接口设计的好坏是仪器改造成败的关键, 为节约成本, 经过调研决定以接口卡的方式来实现。总的设计思想是: 以现有的 PC 机 ISA 槽作为接口卡与计算机连接总线, 以普通的微机作为工业控制机, 为了提高抗干扰能力, 使微机在工作过程中不死

收稿日期: 1999-02-09; 修订日期: 1999-05-17

基金项目: 地矿部科技成果推广项目(No. 9508609)。

作者简介: 修连存(1962-), 男, 河北承德人, 教授级高级工程师, 从事仪器的计算机自动控制研究与应用。

机,所有的状态变化均以查询方式进行,从而避免中断。为了使接口卡适应不同速度的微机,采用自动锁相技术,使微机在控制、定时和计数时不受计算机速度的影响。接口卡的功能包括:步进电机编码输出、测角仪状态输入和小角控制。接口卡的外接部

件全部与理学 X 射线衍射仪相匹配,这样降低了仪器改造的难度。在改造过程中,只要将相应的插件插上即可。此接口适用于日本理学系列、荷兰飞利浦系列、德国西门子系列和国产仪器,可以说是通用型接口板。其原理如图 2 所示。

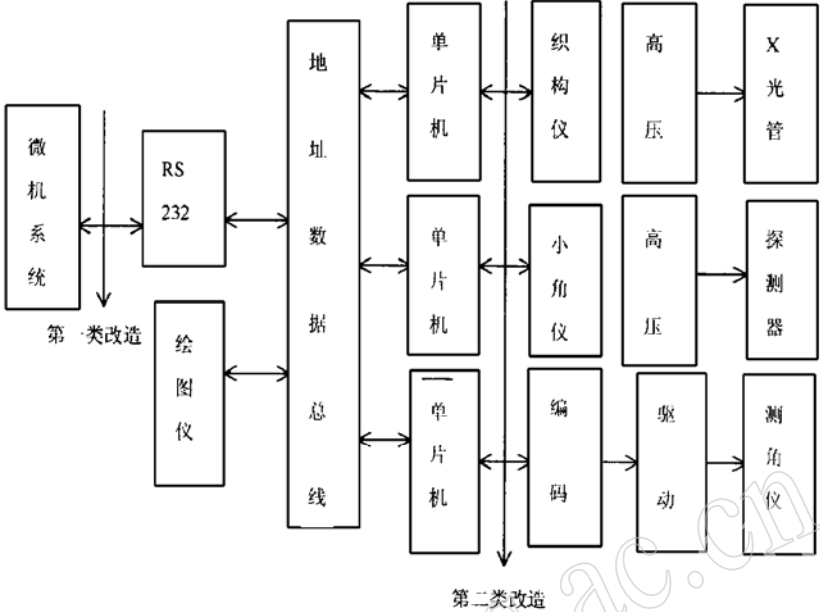


图 1 X 射线衍射仪结构图

Fig. 1 Structure of X-ray diffractometer

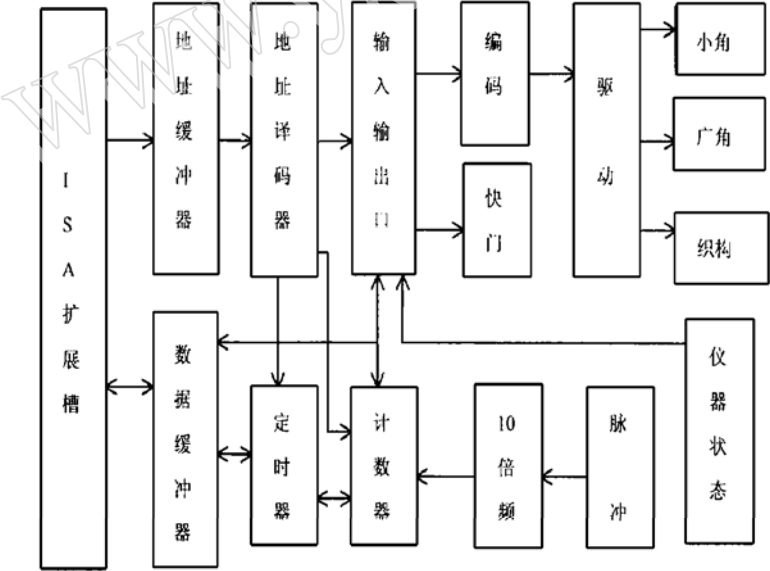


图 2 计算机接口设计原理图

Fig. 2 Principle of computer interface hardware design

4 计算机软件设计^[3]

选择微机软件是仪器改造的重要环节。由于技术原因,国内大多数仪器改造均使用 DOS 系统,但这种控制软件已不适应现代科技发展的需要。目前

比较流行的是基于 WIN 95 系统的 WINDOWS 窗口程序设计,由于窗口程序设计在系统控制上比较复杂,一般计算机水平的人员在技术上无法突破。它的主要难点是:如果程序设计得不合理,在运行过

程中容易死机,这也是微机改造过程中大量使用DOS系统的原因。为此,本课题选用了VB、VC混合编程方式,这两种语言都是基于WINDOWS系统面向对象的编程语言,用VB设计用户界面比较容易,但不能进行低级的I/O控制,VC程序设计比较复杂,非专业人员无法使用,但能够完成灵活的用户界面和低级的I/O系统控制。因此用VB编制用户界面和数据处理,用VC编写一系列微机控制动态

连接库,放在WIN 95的SYSTEM目录下,这样VB就可以自如地对其调用,完成一系列控制功能。

4.1 界面设计

界面设计应当实用、简捷,且采用中文界面,使操作人员不看说明书就能快速掌握操作。界面分为主界面(图3)、广角控制界面(图4)、小角控制界面(图5)和数据处理界面(图6),这些界面既相对独立,又相互联系,可以自由调用。



图3 主界面

Fig.3 Major interface

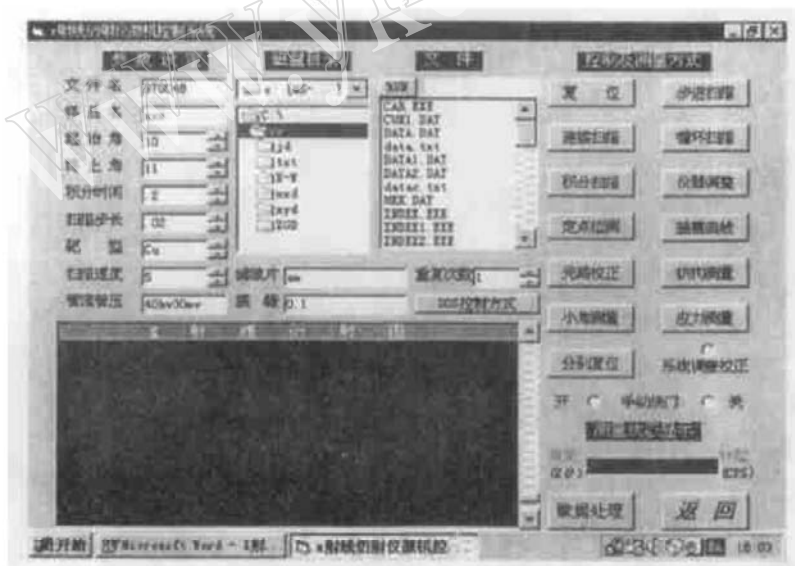


图4 广角控制界面

Fig.4 Interface of wide angle control



图5 小角控制界面

Fig. 5 Interface of minor angle control

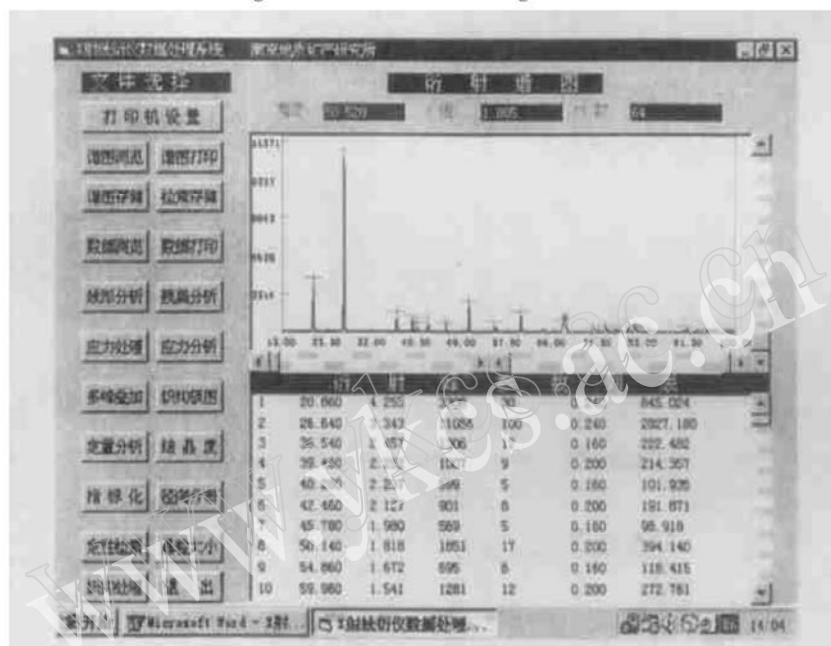


图6 数据处理界面

Fig. 6 Interface of data processing

从以上界面可以看出,在仪器操作过程中,只需通过鼠标就可完成整个操作,同时在操作过程中,软件会自动提示,使操作员不至于出错。

4.2 系统软件编程

系统软件程序划分为系统控制模块和数据处理模块。控制模块包括:复位、连续扫描、步进扫描、积分扫描、重复扫描、仪器调整、光路校正、应力测量、定点检测和摇摆曲线等;数据处理包括:曲线平滑、自动寻峰、去本底、谱图打印、谱图浏览、线形分析、残余分析、晶粒大小、结晶度、指标化、多峰叠加、定量分析、径项分布函数、应力分析和自动检索等。采用模块化设计,每个功能为一个模块,它们是共用的,可相互调用。

上述功能由如下程序组成:

动态连接库 XY.dll, MSVSTD.dll, MFC42D.dll, VB5CHS.dll, STDOE2.dll, OLEAUT32.dll, OLEPRO32.dll, ASYCFILT.dll, CTL32.dll, COMCAT.dll.

控制程序 DTM1- 分别复位, BJD0 20- 反正旋转, DFS- 计数器初始化, DTM12- 同时复位, CAIYANG- 数据采集, YS- 延时, BJD012 20、0- 反向旋转, QISHIWEI- 起始位, BJDP A- 正向旋转, BJUP12 20、0- 正向旋转, PLOT- 绘图, BJUP1 0- 正向旋转, KEYOFF- 快门关, MYSVAE- 数据存储, KEYON- 快门开, BJD010- 反向, BJOPB- 正向旋转, CSH- 初始化, JS2- 计数器, KEYCSN- 快门初始化, DTM13 20、0- 复位, 总共 26 个子程序。

由于数据处理程序为常规程序,且涉及面广,这里不再叙述。

5 软件安装

在安装之前首先检查C盘是否有“C:\XX”目录,如有,先删除(如果是有用的文件,可将其保存在其它的目录下,因本软件使用的目录是“C:\XX”)。全部系统保存在31张3.5英寸的软盘内。首先确认其顺序,在Pwin 95操作系统下,单击“开始”中的“运行”或“我的电脑”,将1号软盘放入微机软驱中,运行SETUP.EXE文件。根据提示依次插入2号和3号软盘……,选择“确定”;观察提示,如安装程序给出“默认目录”,则必须修改此目录,选择“更改目录”,驱动器选择为“C”,路径选择为“C:\XX”,选择“确认”(如果目录不存在,会有提示:“不存在,希望创建该目录吗?”,选择“是”),目录“C:\XX”建成后,单击方框,开始安装。如果在安装过程中出现“注册文件C:\WIN95\SYSTEM\MFC42D.DLL时出错”的提示,可选择“忽略”,此时如程序安装成功,选择“确定”,如果第一次安装失败,可重复

上述操作重新安装。

安装完成后,运行30号盘中的SETUP1.EXE批处理文件,即在XX目录下创建“TXT”、“XYD”、“XXD”、“JD”、“ZGD”和“X-W”6个子目录,至此整个系统全部安装完毕,其中“X-W”目录下的文件为本系统使用说明书。

运行程序,单击“开始”,单击“程序”中“X衍射仪”,程序开始运行并显示封面。

6 实验测试

图6所显示的谱图是SiO₂粉图,下面的数据从左到右分别为角度、*d*值、峰高、峰强比、半高宽和峰面积。这些图谱和数据可通过打印机打印出来。

7 参考文献

- [1] Rigaku Corporation. Instruction Manual for Goniometer PMG A-2[S]. Tokyo.
- [2] 王士元,吴芝芳. IBM PC/XT(长城0520)接口技术及应用[M]. 天津:南开大学出版社,1990. 410~435.
- [3] 东箭工作室. Visual Basic 5.0 中文版程序设计[M]. 北京:清华大学出版社,1997. 98~214.

Updating of Computer System in General X-ray Diffractometer

XIU Lian-cun, HUANG Jun-jie, YU Zheng-kui
(Nanjing Institute of Geology and Mineral Resources, Nanjing 210016, China)

Abstract: Based on the detailed study on the structure of X-ray diffractometer, an updated computer system, including computer interface, hardware and software, in general X-ray diffractometer is developed. Safety and convenience of operation are took full consideration in the new system.

Key words: X-ray diffractometer; updating of computer system; software; interface; hardware