

基于 LabVIEW 的共振增强多光子电离光谱数据采集系统

秦朝朝,张艳荣,汪 宝,白陈冰,郑帅锋

(河南师范大学 物理与电子工程学院,河南 新乡 453007)

摘 要:利用共振增强多光子电离光谱研究分子的第一电子激发态振动光谱,往往需要建立一套高速的数据采集、实时处理以及分析系统.用 LabVIEW 程序编写该系统的软件部分,能够完成对激光波长和飞行时间质谱及其谱峰面积的实时采集和自动化控制.本文介绍了该系统的硬件组成以及软件设计,并把该系统用于研究萘分子的第一电子激发态振动光谱,其中发现被激发的主要是平内振动模式.

关键词:共振增强多光子电离光谱;LabVIEW;飞行时间质谱

中图分类号:O664

文献标志码:A

共振增强多光子电离(Resonance Enhanced Multi-photon Ionization, REMPI)光谱作为一种新的光谱表征技术始于 20 世纪 70 年代中期,是激光光谱学中的一个重要分支^[1-3].利用共振增强多光子电离光谱获得的数据与量子化学理论分析相结合,人们能够得到分子、自由基、团簇等在电子激发态的振动和转动精细结构.由于分子在电子激发态的振动精细结构是分子所特有的,所以共振增强多光子电离技术可以选择性地把分子激发到某个振动或转动态,实现态选择,这在化学成分分析、光化学反应和态-态分辨化学反应动力学等领域有着广泛的应用前景.自 20 世纪 80 年代,我国多个单位相继报道了利用共振增强多光子电离光谱技术研究分子的电子激发态振动和转动光谱^[4-8].然而文献中关于基于 LabVIEW 的共振增强多光子电离光谱数据采集系统鲜有报道.

20 世纪 80 年代中期,美国国家仪器公司(National Instrument, NI)首先提出了“软件就是仪器”这一虚拟仪器的概念. LabVIEW 是 NI 公司开发的全图形化的编程语言,主要面向向虚拟仪器技术的研发.现今,虚拟仪器设计已经广泛应用纷纷提供了 LabVIEW 子程序,非常适合于缺乏编程经验或没有时间编程的科研于物理学、化学、电子测量和自动化控制等领域,而且世界上许多大的仪器公司工作者.虚拟仪器的主要作用就是获取真实物理世界的的数据,所以虚拟仪器设计的核心就是数据采集系统^[9].本文拟采用 LabVIEW 实现共振增强多光子电离光谱中的数据采集、实时处理和自动化控制.

1 系统的硬件组成和软件设计

本系统使用的激光器包括光泵浦掺钕钇铝石榴石 Nd:YAG 固体激光器(Quanta-Ray Lab-170)和染料激光器(Sirah, Cobra-Stretch),其中 Nd:YAG 激光器的基频光为 1064nm,经过倍频系统后可产生波长为 532 nm 的 2 倍频以及 355 nm 的 3 倍频纳秒激光.染料激光器在 Nd:YAG 激光器的 2 倍频或 3 倍频光的泵浦下可以产生一段波长范围内的连续输出(本实验采用 Nd:YAG 的 2 倍频光 532 nm 作为泵浦光.实验中使用的染料为 Rhodamine 590 和 Rhodamine 610,可调谐范围分别为 552~580 nm 和 576~600 nm).染料激光器输出的激光经过倍频系统后与飞行时间质谱仪(Time-of Flight, TOF)里的超声分子束作用,分子在激光作用下被多光子电离,产生的离子在离子透镜作用下飞向微通道板探测器(Micro Channel Plate, MCP).

收稿日期:2014-07-14;修回日期:2014-09-11.

基金项目:国家自然科学基金(U1404112);河南省科技攻关项目(142102310274);河南省教育厅科学技术研究重点研究项目(15A140024);河南师范大学博士科研启动项目(qd12109).

作者简介(通信作者):秦朝朝(1984-),男,河南辉县人,河南师范大学讲师,主要从事分子光谱和超快动力学研究, E-mail:qinch@hotmail.com.

微通道板探测器通过耦合电路与多通道信号采集器 MCS(Multichannel Scaler, Standard Research Systems, SR430)连接,它的作用是可以将微弱的离子信号进行累加.实验过程中多通道信号采集器 MCS 上显示飞行时间质谱.我们设定实验时的累加次数为 300,也就是在每个波长下有 300 个激光脉冲与分子作用,将 300 次所产生的离子信号累加起来.激光的脉冲频率是 10 Hz,记录 300 次,可预计每次一个数据的记录大约需要 30 s.多通道信号采集器通过 NI 公司的 GPIB 转 USB 连接器(GPIB-USB-HS)与计算机连接把数据传输到电脑.实验中每 30s 改变波长 0.02 nm,因此便可得到在不同波长下的离子信号强度,也就是光谱.

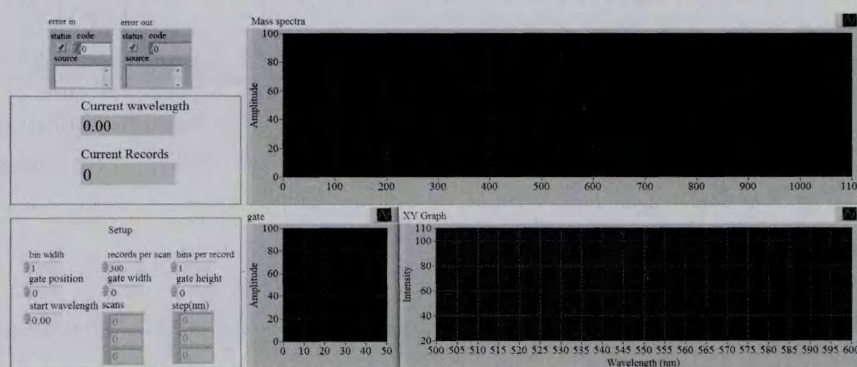


图1 采集程序的前面板

全部程序采用 LabVIEW 编写^[10], LabVIEW 可以为染料激光器和多通道信号采集器 MCS 的编程提供许多标准的 VI,相比于 Visual C++ 等编程语言,非常的简单易用,可以较好地满足实验的需要.图 1 为软件的前面板.

2 系统操作步骤介绍

- 1) 初始化波长和数据数组变量,设定质量门位置(gate position)、宽度(gate width)、高度(gate height)、扫描步长(step(nm))、步数(scans)和初始波长(start wavelength).
- 2) 打开染料激光器和多通道信号采集器 MCS 仪器接口,设定多通道信号采集器 MCS 仪器的 bin width, records per scan 和 bins per record 等参数.
- 3) 利用 LabVIEW 给染料激光器发送指令,使得染料激光器里的光栅移动到一个初始位置,即对应实验过程中的初始波长,并在 current wavelength 中显示当前波长.
- 4) 当光栅到达指定初始位置之后,染料激光器输出的激光波长为选定的激光波长,激光与飞行时间质谱仪里的超声分子束作用,分子在激光的作用下被电离,产生的离子在电场的作用下飞向微通道板探测器,经多通道信号采集器 MCS 输入计算机在采集程序前面板的质谱波形图上显示.
- 5) 利用 LabVIEW 的数组功能将飞行时间质谱上的离子峰选取显示在前面板的质量门波形图上,并对选取的质谱峰进行积分计算.把 current wavelength 的数据插入波长数组的第一个元素,谱峰积分结果插入到数据数组的第一个元素.以波长数组为横坐标,数据数组为纵坐标即可在 Express XY 图中显示当前的共振增强多光子电离光谱.
- 6) 改变染料激光器的波长,然后重复 2)~4) 可得到不同波长上的飞行时间质谱以及信号强度.直到把需要的波长所对应的飞行时间质谱峰和信号强度采集完.
- 7) 对前面板共振增强多光子电离光谱 Express XY 图中的波长数组和数据数组进行保存.
- 8) 关闭染料激光器接口和多通道信号采集器 MCS 接口.

3 在共振增强多光子电离光谱中的应用

如图 2 所示为利用共振增强多光子电离光谱采集系统得到的茚分子的第一电子激发态振动光谱.测得的茚分子的第一电子激发态的带源位于 $34\ 725\ \text{cm}^{-1}$.此外,还观察到茚分子被激发的第一电子激发态振动

为平面内振动模式.

4 结束语

本文介绍了以 LabVIEW 软件为基础的共振增强多光子电离光谱数据采集系统的硬件组成以及软件的设计. 该系统可以实现对不同波长离子信号进行采集和实时处理. 将该系统应用到对茛分子的第一电子激发态振动光谱研究中, 测得茛分子第一电子激发态振动光谱的带源为 $34\ 725\ \text{cm}^{-1}$. 此外, 发现茛分子第一电子激发态振动光谱中被激发的主要是平面内振动模式.

参 考 文 献

- [1] Letokhov V S. Laser Photoionization Spectroscopy [M]. Orlando: Academic Press, 1987.
- [2] Brutschy B. The Structure of Microsolvated Benzene Derivatives and the Role of Aromatic Substituents[J]. Chemical Review, 2000, 100: 3891-3920.
- [3] Dessent C E H, Dethlefs K M. Hydrogen-Bonding and van der Waals Complexes Studied by ZEKE and REMPI Spectroscopy[J]. Chemical Review, 2000, 100: 3999-4022.
- [4] Gu Z, Chen M, He C, et al. Using Ion-velocity Map Imaging Technique to Study Photodissociation of 2-Bromopentane[J]. Chinese Journal of Chemical Physics, 2013, 26: 493-497
- [5] Yang J J, Hu X Y, Wu H X, et al. Measurement of Photoionization Cross Sections of the Excited States of Titanium[J]. Chinese Journal of Chemical Physics, 2009, 22: 615-620
- [6] Wang J, Zhu R S, Qin C, et al. Vibrational spectra and trace determination of p-difluorobenzene and ethylbenzene[J]. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2013, 107: 1-7.
- [7] Wang J, Qiu X J, Wang Y M, et al. Vibrational Spectra and Quantum Calculations of Ethylbenzene[J]. Chinese Journal of Chemical Physics, 2012, 25: 526-532.
- [8] Dong C W, Zhang L J, Liu S, et al. Resonance Enhanced multiphoton ionization spectroscopy and theoretical calculations of *cis*- and *trans*-*m*-aminostyrene rotamers[J]. Journal of Molecular Structure, 2014, 1058: 205-212.
- [9] 王建群, 南金瑞, 孙逢春, 等. 基于 LabVIEW 的数据采集系统的实现[J]. 计算机工程与应用, 2003, 39(21): 122-125.
- [10] 郑对元. 精通 LabVIEW 虚拟仪器程序设计[M]. 北京: 清华大学出版社, 2012.

Data Acquisition Aystem for Resonance Enhanced Multi-photon Ionization Spectroscopy Based on LabVIEW

QIN Chaochao, ZHANG yanrong, WANG Bao, BAI Chenbing, ZHENG Shuaifeng

(College of Physics and Electronics Engineering, Henan Normal University, Xinxiang 453007, China)

Abstract: For the study of the vibrational spectroscopy in the first molecular excited state using resonance enhanced multi-photon ionization, a high-speed data sampling, processing and analyzing system was developed. The system, which was programmed by graphic language LabVIEW, can be used to control the laser wavelength, measure mass spectroscopy and relevant peak area synchronously. In this paper, we give a detail introduction on the design of the hardware and software and apply it to the study of vibrational spectroscopy of indene in the first excited state.

Keywords: resonance enhanced multi-photon ionization; LabVIEW; time-of flight

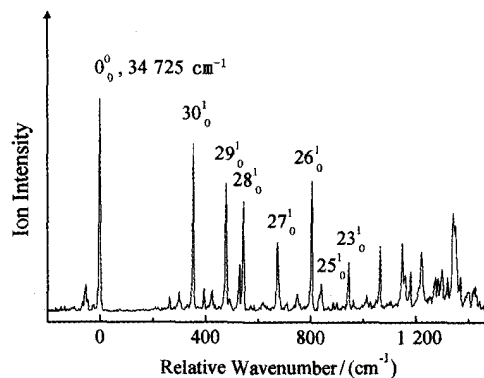


图 2 茛的第一电子激发态振动光谱