

**INTERFACE ENTRE UM MICROCOMPUTADOR DE 8 BITS E UM ESPECTRÔMETRO DE MASSAS QUADRUPOLAR**

G.G.B. de Souza, F.C. Pontes e J.B. Maciel

Departamento de Físico-Química, Instituto de Química da UFRJ

Cidade Universitária, 21910 – Rio de Janeiro (RJ)

Recebido em 04/09/90

**A commercial quadrupole mass spectrometer has been interfaced to a Brazilian 8-bit microcomputer. The simple and efficient interface is based on a 12-bit digital-to-analog converter (DAC 1231) and allows, among other things, the study of low-intensity signals by repeatedly accumulating the same spectrum, thus considerably improving the signal-to-noise ratio.**

**1. INTRODUÇÃO**

Da colisão de elétrons de alta energia com moléculas resulta uma vasta gama de processos de excitação e ionização, cujo estudo é importante para áreas como Física de Plasmas, Astrofísica e Técnicas de Caracterização de Materiais, tais como Análise por Microsonda, Espectroscopia Auger, Espectrometria de Massa, etc<sup>1</sup>. Em nosso laboratório temos utilizado de forma sistemática a técnica de perda de energia de elétrons para a determinação de espectros de excitação eletrônica de compostos em fase gasosa<sup>2, 3</sup>, na região do ultravioleta de vácuo. A energia dos elétrons empregados (200 a 2000 eV) situa-se bem acima dos potenciais de simples e dupla ionização da maioria dos compostos conhecidos e, dessa forma, além dos processos de excitação, verificam-se também processos de ionização e fragmentação moleculares. Com o objetivo de analisar estes processos como função da energia dos elétrons incidentes, acoplamos ao espectrômetro de impacto de elétrons um espectrômetro de massa comercial, do tipo quadrupolar (Balzers, modelo QMG 311). A este aparelho adaptamos uma lente de modo a poder estudar os íons formados no centro de colisão do espectrômetro de impacto de elétrons. Uma séria dificuldade observada no trabalho com este espectrômetro consiste na medida de processos de baixa intensidade, uma vez que o aparelho havia sido adaptado de fábrica para o uso de um registrador gráfico, sendo portanto impossível a acumulação repetidas vezes de um mesmo espectro, uma das possíveis soluções para contornar esta dificuldade. Sendo esta uma das diversas opções disponíveis em aparelhos dotados de controle digital, decidimos interfacear o espectrômetro quadrupolar a um computador de oito bits, de baixo custo e já disponível no laboratório.

A interface utiliza um circuito integrado conversor digital/analógico de 12 bits para selecionar a massa sob análise e no tempo de aquisição do sinal este conversor assume a função de um conversor analógico/digital com auxílio de um comparador. Com a utilização do microcomputador, pode-se agora selecionar regiões de análise de interesse, acumular espectros de modo a melhorar a relação sinal/ruído, armazenar espectros em disco, etc.. Embora sejam conhecidos na literatura sistemas bastante mais complexos, baseados inclusive no emprego de computadores de 16 bits<sup>4</sup>, acreditamos que a presente interface, pela sua simplicidade e baixíssimo custo, possa ser de interesse de outros laboratórios nacionais.

**2. A INTERFACE**

O elemento principal da interface (figura 1) é o circuito integrado DAC 1231, que é um conversor digital/analógico de 12 bits com um tempo de conversão máximo de 1 $\mu$ s. O funcionamento do circuito pode ser sucintamente descrito da seguinte maneira: o amplificador 1 converte a saída de corrente do DAC em tensão na faixa de 0-3 volts. O sinal de tensão obtido desta forma é utilizado tanto no circuito de seleção de massa sob análise como no circuito de determinação de intensidade do sinal no detector do quadrupolo. Quando se está selecionando uma determinada massa o circuito de retenção é acionado de modo que o sinal fornecido pelo amplificador 1 fica fixado na entrada de alta impedância do amplificador 2, que tem a função de expandir a escala para 0-10 volts, de acordo com a entrada do controlador do quadrupolo. No fim deste processo há um loop de espera programável (da ordem de dezenas de milissegundos), pois antes do início da conversão do sinal analógico para o digital, o circuito controlador do quadrupolo e o amplificador de elétrons devem estar estáveis. Em seguida inicia-se o processo de conversão analógica/digital, que consiste em comparar o sinal do detector com a tensão gerada pelo DAC, o qual é comandado por software através de um algoritmo de aproximações sucessivas, que leva um tempo aproximado de 750 $\mu$ s. E assim, para cada massa selecionada, obtém-se a sua respectiva intensidade, resultando em um conjunto de dados que representa o espectro de massas da substância em análise.

**3. PROGRAMA DE AQUISIÇÃO DE ESPECTROS**

O programa de aquisição consiste em várias sub-rotinas escritas em Turbo Pascal CP/M com funções específicas, tais como armazenagem de espectros em disco, varredura e plotagem de espectros e duas sub-rotinas escritas em linguagem de máquina Z80, que inicializam e fazem a aquisição de dados do quadrupolo.

O usuário pode a qualquer momento, durante a operação, selecionar faixas de massas, velocidade de varredura e acumular quantos espectros forem necessários para uma boa definição do espectro, melhorando a relação sinal/ruído e, no momento em que for armazenar o espectro, deverá informar ao microcomputador as condições de aquisição que não estão

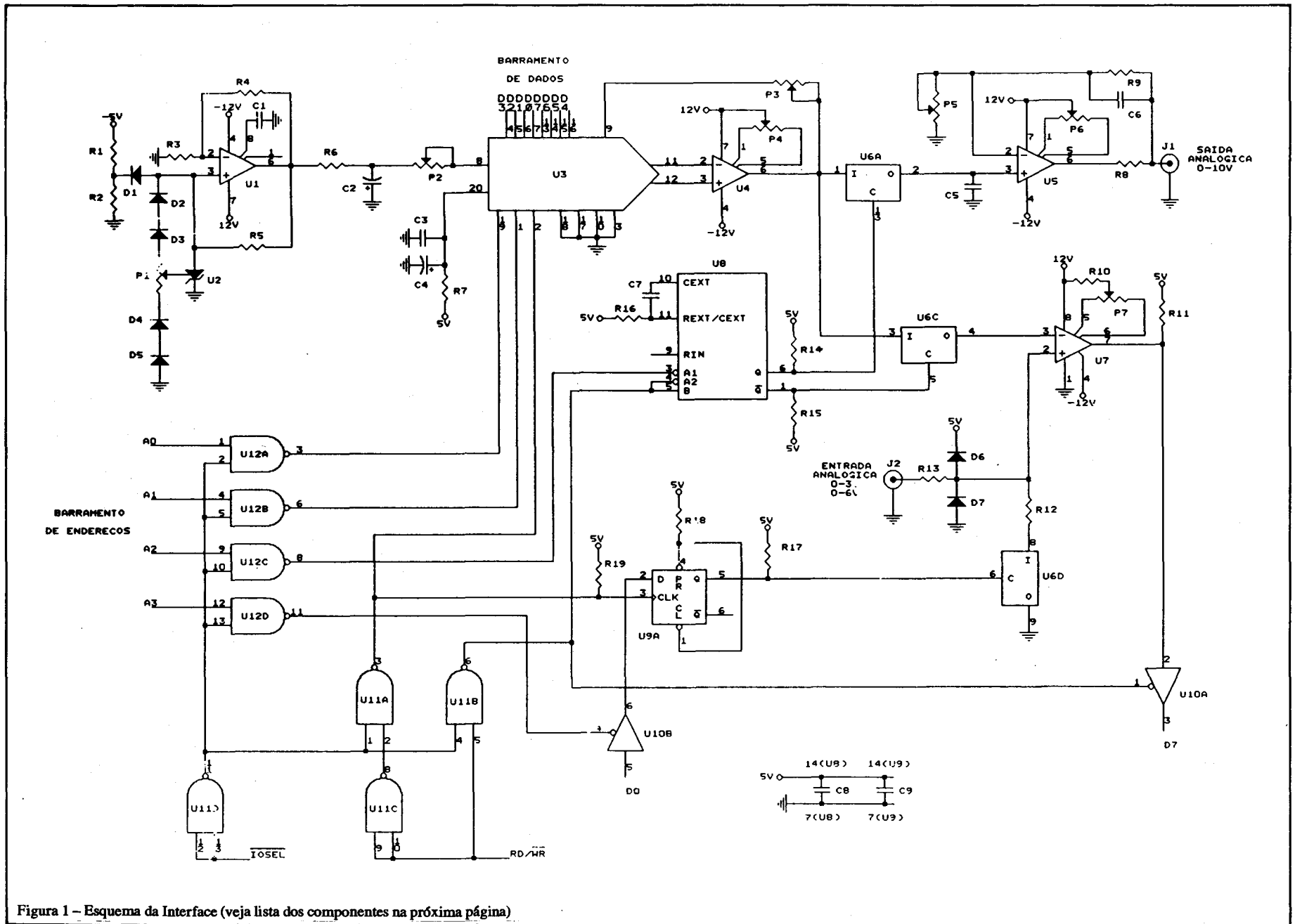


Figura 1 - Esquema da Interface (veja lista dos componentes na próxima página)

## Lista de Componentes: – Esquema da Interface

### a) Semicondutores:

U1 – LM308H  
U2 – LM336  
U3 – DAC1231  
U4, U5 – LF356H  
U6 – 4016  
U7 – LM311  
U8 – 74121  
U9 – 74LS74  
U10 – 74125  
U11, U12 – 7400  
D1 a D7 – IN914

### b) Resistores:

R1, R8, R14, R15, R17, R19 –  $1K\Omega \times 1/8W$   
R2, R16, R18 –  $4.7K\Omega \times 1/8W$   
R3, R4, R9 –  $10K\Omega \times 1/8W$  metal film  
R5, R10 –  $3.3K\Omega \times 1/8W$   
R6 –  $30K\Omega \times 1/8W$  metal film  
R7 –  $10\Omega \times 1/8W$   
R11 –  $470\Omega \times 1/8W$   
R12, R13 –  $7.5K\Omega \times 1/8W$  metal film

### c) Capacitores:

C1, C7 – 1nF plate  
C2 –  $1\mu F \times 35v$  tântalo  
C3, C8, C9 – 100nF cerâmico  
C4 –  $3.3\mu F \times 25v$  tântalo  
C5 – 470pF plate  
C6 – 47pF plate

### d) Diversos:

P1 – Trimpot  $10K\Omega$   
P2, P4, P6 – Trimpot  $50K\Omega$   
P3 – Trimpot  $100\Omega$   
P5, P7 – Trimpot  $5K\Omega$   
J1, J2 – Plug RCA  
Protoboard para APPLE

sob o controle do microcomputador, tais como pressão do gás, energia de impacto dos elétrons, voltagem do detector, etc... Desse modo é gerado em disco um arquivo contendo todas as informações relativas à aquisição, facilitando a organização<sup>5</sup>.

## 4. RESULTADOS

Foram realizados testes de linearidade na interface, que visam verificar se o sinal gerado pela interface é linear em função do número escrito pelo microcomputador no conversor D/A. Com este teste obteve-se um coeficiente de correlação igual a 0,99999986, o qual constatou a boa linearidade do circuito.

O DAC escolhido permite obter no pior caso, utilizando apenas 11 dos 12 bits (2048 canais), 7 pontos para a varredura de uma unidade de massa na faixa de 4 a 300 UMA, o que supera a resolução do aparelho. O mesmo acontece na faixa de 1 a 100 U.M.A., na qual se tem 20 pontos para a varredura de uma unidade de massa atômica, que é muito superior à resolução do aparelho.

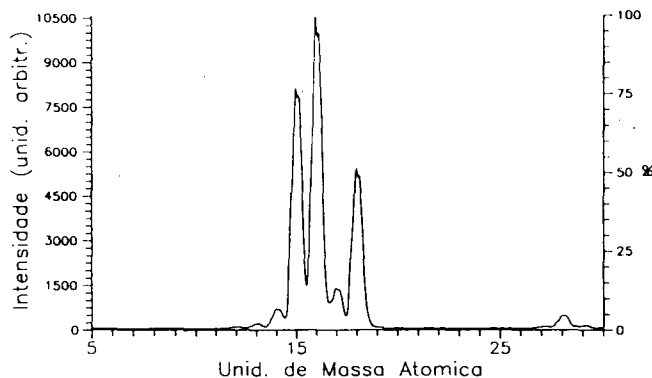


Figura 2 – Espectro de massa da mistura  $CH_4 + ar$ . Energia de impacto = 1000 eV

Como exemplo do funcionamento do espectrômetro quadrupolar com a nova interface apresentamos na figura 2 um espectro da mistura metano/ar obtido com elétrons de 1000eV. Os picos observados nas massas 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18 e 28 correspondem aos íons  $C^+$ ,  $CH^+$ ,  $CH_2^+$ ,  $CH_3^+$ ,  $CH_4^+$ ,  $OH^+$ ,  $H_2O^+$  e  $N_2^+$ . A escala da esquerda mostra o número total de contagens acumuladas e a da direita, as porcentagens relativas (o 100% da escala corresponde à intensidade do pico mais intenso do espectro).

## 5. CONCLUSÃO

O emprego de um microcomputador de oito bits, de baixo custo, no controle de um espectrômetro de massas quadrupolar, amplia bastante as possibilidades de trabalho com este último. Por exemplo, espectros podem ser acumulados repetidas vezes, armazenados na memória do computador para posterior análise; além disso, pode-se obter espectros em intervalos selecionados de massa, etc. A interface descrita nesta nota, de fácil construção, revelou-se eficiente e confiável.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FINEP pelo apoio financeiro e ao CNPq e FAPERJ pela concessão, respectivamente, de uma bolsa de pesquisador (G.G.B.S.) e de iniciação científica (J.B.M.).

## REFERÊNCIAS

1. Massey, H.S.W.; Burhop, E.H.S.; Gilbody, H.B.; "Electronic and Ionic Impact Phenomena", vol. I, Oxford at the Clarendon Press, 1969.
2. Souza, G.G.B. de; Souza, A.C.A.; *J. Phys. E: Sci. Inst.* (1985), **18**, 1037.
3. Bielschowsky, C.E.; Souza, G.G.B. de; Lucas, C.A.; Roberty, H.M.B.; *Phys. Rev. A* (1988), **38**, 3405.
4. Lago, C.L. do; Kascheres, C.; *Química Nova* (1988), **11**, 377.
5. Uma cópia dos programas poderá ser obtida com os autores, a partir do envio de um disquete ao nosso laboratório.