

VĚDECKÉ SPISY VYSOKÉHO UČENÍ TECHNICKÉHO V BRNĚ

Edice Habilitační a inaugurační spisy, sv. 489

ISSN 1213-418X

Jiří Pechoušek

**VYUŽITÍ TECHNIKY
VIRTUÁLNÍ INSTRUMENTACE
PŘI VÝVOJI MĚŘICÍCH SYSTÉMŮ
PRO JADERNOU FYZIKU
SE ZAMĚŘENÍM NA REALIZACI
MÖSSBAUEROVA SPEKTROMETRU**

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta strojního inženýrství

Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci

RNDr. Jiří Pechoušek, Ph.D.

**VYUŽITÍ TECHNIKY VIRTUÁLNÍ INSTRUMENTACE PŘI VÝVOJI
MĚŘICÍCH SYSTÉMŮ PRO JADERNOU FYZIKU SE ZAMĚŘENÍM
NA REALIZACI MÖSSBAUEROVA SPEKTROMETRU**

UTILIZATION OF VIRTUAL INSTRUMENTATION TECHNIQUE
IN THE NUCLEAR PHYSICS MEASUREMENT SYSTEMS
AND THE MÖSSBAUER SPECTROMETER REALIZATION

ZKRÁCENÁ VERZE HABILITAČNÍ PRÁCE



BRNO 2014

KLÍČOVÁ SLOVA

virtuální instrumentace; LabVIEW; jaderný měřicí systém; Mössbauerův spektrometr.

KEYWORDS

virtual instrumentation; LabVIEW; nuclear measurement system; Mössbauer spectrometer.

HABILITAČNÍ PRÁCE JE ULOŽENA:

Habilitační práce je uložena v Areálové knihovně FSI VUT v Brně.

Obsah

1. Životopis	4
2. Číslicové měřicí systémy	5
2.1. Virtuální měřicí přístroj	6
2.2. Řízení měřicích přístrojů	6
3. Využití virtuální instrumentace v jaderné fyzice	7
3.1. Zpracování signálu z detektoru – digitalizace	7
3.1.1. Simulace generování impulzů	8
3.1.2. Základní zpracování impulzů	9
3.2. Zpracování, tvarování a měření amplitudy impulzů	11
3.2.1. Amplitudový analyzátor	12
3.2.2. Vliv vysoké vzorkovací rychlosti	12
3.3. Koincidenční techniky	13
3.3.1. Měření doby života	14
3.4. Další techniky virtuální instrumentace používané v jaderných systémech	15
4. Mössbauerova spektroskopie	16
4.1. Mössbauerův jev	16
4.2. Konstrukce Mössbauerových spektrometrů	17
4.2.1. Elektronická řešení spektrometrů	18
4.2.2. Konfigurace spektrometru	19
5. Realizace virtuálního Mössbauerova spektrometru	20
5.1. Amplitudový analyzátor a akumulace spekter	20
5.2. Systém řízení rychlosti	22
5.3. Spektroskopický systém s nulovou mrtvou dobou	23
6. Inovace výuky oborů Aplikovaná fyzika a Přístrojová fyzika	24
7. Závěr	24
Seznam použitých zdrojů	26

1. Životopis

Jméno: Jiří Pechoušek
Titul: RNDr., Ph.D.
Rodinný stav: ženatý, 1 syn, 1 dcera
Datum a místo narození: 19. ledna 1978, Litoměřice

Vzdělání

- 2008 - Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci, Katedra experimentální fyziky; studijní obor Aplikovaná fyzika, 28. března 2008 udělen akademický titul RNDr., název práce „Improving Detector Signal Processing with Pulse Height Analysis in Mössbauer Spectrometers“.
- 2004 – 2006 - Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci, Katedra experimentální fyziky; kombinovaná forma doktorského studia oboru Aplikovaná fyzika, studium ukončené státní doktorskou zkouškou 25. listopadu 2005, téma dizertační práce „Mössbauerův spektrometr jako virtuální měřicí přístroj v modulárním systému PXI“, obhajoba 18. července 2006.
- 2001 – 2004 - Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci, Katedra experimentální fyziky; prezenční doktorské studium oboru Přístrojová fyzika a metrologie.
- 1996 – 2001 - Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci, Katedra experimentální fyziky; obor Aplikovaná fyzika se zaměřením na přístrojovou fyziku a metrologii, studium ukončené státní závěrečnou zkouškou 29. ledna a 21. května 2001, téma diplomové práce „Systém regulace teploty 15 až 300 K pro měření Mössbauerových spekter“, obhajoba 10. května 2001.
- 1992 – 1996 - Střední průmyslová škola strojní, Česká Lípa; studium ukončené 28. května 1996 maturitní zkouškou.

Praxe

- 2010 – dosud - junior researcher, Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci.
- 2008 – dosud - odborný asistent, Katedra experimentální fyziky, Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci.
- 2004 – 2008 - vědecký pracovník, Katedra experimentální fyziky, Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci.

Odborná specializace

- Aplikace číslicových měřicích systémů při řízení experimentů, automatizace měření v laboratoři Mössbauerovy spektroskopie, vývoj spektrometrů využívajících moderní HW a SW techniky, hledání a realizace nových metodik měření. Provoz, obsluha a údržba sestav kryogenních systémů s Mössbauerovými spektrometry pro měření za nízkých teplot až do 1,5 K a ve vnějším magnetickém poli až do 8 T.
- Měření specifické plochy povrchu a porozity materiálů (provoz, obsluha a údržba přístrojů využívajících metody fyzisorpce a chemisorpce plynů, vyhodnocování měření), využití metody při charakterizaci nanomateriálů.

Další údaje

- Hlavní autor nebo spoluautor 32 vědeckých publikací uvedených na Web of Science (164 citací bez autocitací; k 31. 10. 2014). Spoluautor 4 užitečných vzorů nebo národních patentů.
- Aktivní účast na 12 mezinárodních konferencích. 7 týdnů na zahraničních stážích a školení (Maďarsko, Turecko, USA).
- Vedoucí 19 bakalářských nebo diplomových prací (z toho 6 probíhá v roce 2014). Školitel 4 dizertačních prací.
- Vedení předmětů Číslicové měřicí systémy 1 až 4, Virtuální instrumentace v experimentech jaderné fyziky, Přístrojová fyzika pro nanotechnologie 1 a 2, Metoda sorpce plynu.
- Komerční výroba Mössbauerových spektrometrů a příslušenství, smluvní výzkum.

2. Číslicové měřicí systémy

V posledních dvou desetiletích se v měřicích, testovacích a řídicích systémech využívá čím dál častěji vývojové prostředí LabVIEW™ od firmy National Instruments, které poskytuje efektivní formu jejich vývoje. V této práci je podán přehled o možnostech aplikace tzv. virtuální instrumentace v laboratorních systémech, zejména v jaderné fyzice. Tato technika je založena na využívání zejména komerčně dostupných měřicích zařízení a jejich ovládání přes počítač pomocí programování ve vývojovém prostředí.

Digitální zpracování signálů (DSP – Digital Signal Processing) je používáno ve všech inženýrských oblastech, včetně experimentů v jaderné fyzice, pro účely nahrazení konvenčních analogových systémů a pro tvorbu měřicích a testovacích systémů. DSP systémy se aplikují v experimentech jaderné fyziky z důvodu jejich vysoké výkonnosti v energetické i časové doméně.

Číslicový měřicí systém (CMS) může být jednoduchá sestava přístroje s počítačem, ale také složitý systém vhodný například pro úplné testování komplikovaných zařízení. **Počítačem řízené CMS** jsou většinou v provedení měřicích karet (modulů) vkládaných přímo do slotů v počítači případně do průmyslového rámu. Primárními prvky CMS jsou obvykle senzory (čidla, detektory). Signály ze senzorů mohou být zpracovávány vstupními prvky systému a obvody pro úpravu signálu (zesilovače, filtry atd.) před jejich přivedením do systému. Upravené signály jsou číslicově změřeny (navzorkovány a digitalizovány) „data zpracovávajícím blokem“ označovaným jako DAQ zařízení (DAQ – Data Acquisition), přeneseny a vyhodnoceny v počítači. Ten je s ostatními prvky propojený přes přístrojová (komunikační) rozhraní zajišťujícími vzájemnou komunikaci a přenos dat. Dále je zde také možnost komunikace tohoto systému s jinými systémy v počítačové síti, případně lze systém ovládat vzdáleně.

Měřicí systémy lze obecně rozdělit z pohledu modifikovatelnosti na otevřené a uzavřené. **Otevřený CMS** je systém, ve kterém je řízení založeno na hlavní jednotce (počítač, řídicí jednotka) s možností jednoduše doplňovat systém o nové moduly zprostředkovávající další různé funkce. **Uzavřený CMS** pak představuje jednoúčelový systém. Důležitou vlastností otevřeného CMS je jeho případná modularita. **Modulární CMS** je sestava řídicího modulu s měřicími moduly v zásuvném rámu, vzájemně propojenými vnitřními sběrnicemi, vykazujícími výraznou flexibilitu.

Digitální osciloskopy ve formě externích a zásuvných karet do osobního počítače a ve formě modulů do modulárních systémů, **digitizéry**, poskytují otevřenou architekturu konstrukce CMS s výhodou velké propustnosti dat. Na obrázku 1 jsou znázorněny vysokorychlostní digitizéry firmy National Instruments (NI) pro různé platformy.



Obrázek 1 | USB, PCI a PXI vysokorychlostní digitizéry (National Instruments).

Programováním CMS se rozumí tvorba aplikace (většinou včetně uživatelského rozhraní) určené pro řízení celého systému nebo jeho jednotlivých částí. Při vývoji měřicích aplikací se používají **vývojová prostředí**, kde se tvoří kód pro získání, zpracování a prezentaci dat. **Uživatelské rozhraní** pro komunikaci mezi číslicovým měřicím systémem a pracovníkem obsluhy, označované také jako HMI (Human Machine Interface), má většinou grafickou podobu aplikace zobrazované na monitoru počítače. Na tomto panelu jsou zobrazeny digitální displeje podobné těm, které se používají v klasických měřicích přístrojích a uživatel může měnit vstupní parametry pomocí klávesnice, myši a grafických ovladačů. Někdy jsou HMI moduly jako programová aplikace nebo modul fyzicky připojen k CMS.

Počítač (řídicí modul) s obslužným prostředím může nahradit několik samostatných přístrojů s kabeláží a blokem napájení, může také nahradit někdy nespolehlivé mechanické části. Číslicový měřicí systém se tak stává **virtuálním** (softwarovým), zpracovávající reálné signály.

2.1. Virtuální měřicí přístroj

Současné technologie umožňují dříve složité analogové obvody nahradit výkonným měřicím DAQ zařízením a DSP softwarem. Vše je pak řízeno z hlavního počítače a vzniká tzv. **virtuální přístrojová technika** jako kombinace hardwaru a softwaru s průmyslově standardizovanými počítačovými technologiemi, určená k tvorbě uživatelsky definovaných přístrojových řešení. Základním principem virtuální přístrojové techniky je možnost použití jednoho měřicího zařízení pro více rozdílných aplikací. Konečné použití vytvořeného ČMS tedy určuje programátor a ne výrobce zařízení. Virtuální měřicí přístroje jsou v podstatě otevřené ČMS.

Virtuální měřicí přístroj (VI – Virtual Instrument) zpracovává získaná data reprezentující reálné signály převážně softwarově podle vytvořených algoritmů a programových sekvencí. Při tvorbě virtuálních měřicích přístrojů se v rámci vývojového prostředí využívají různé programové prostředky, přístrojové ovladače měřicích zařízení a knihovny podprogramů pro začlenění do nadřazeného programu. Způsob používání měřicího hardwaru je pak dán programy vytvořenými na základě volání těchto prostředků.

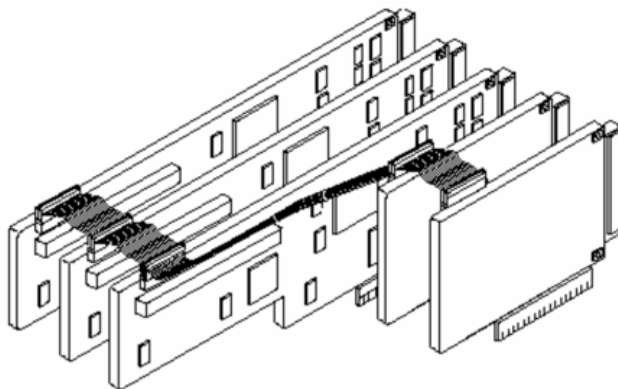
2.2. Řízení měřicích přístrojů

Téměř každý moderní měřicí přístroj je vybaven přístrojovým rozhraním (konektorem) pro začlenění do měřicího systému a jeho vzdálené řízení. Počítačem řízený ČMS také může využívat tzv. **modulární systémy**. Zde jsou jednotlivé přístroje ve formě zásuvných desek nebo modulů, které se zasouvají do rámu a zprostředkovávají tak mechanické a elektrické propojení. Řídicí počítač je také nejčastěji ve formě modulu, pokud se nejedná přímo o osobní počítač, může jít o externí řídicí systém připojený k modulárnímu systému přes externí rozhraní. Modulární systémy umožňují kombinovat komunikační sběrnice a měřicí hardware do jednoho zařízení a zahrnují především PCI, PCI Express (PCIe), VME, VXI, PXI a PXI Express (PXIe) systémy. Měřicí karty pro počítačové ČMS, DAQ zařízení, jsou dnes převážně pro sběrnici PCI nebo PCI Express a vyznačují se vysokou výkonností a rychlým přenosem dat. Se zaváděním nových rychlých vnějších rozhraní se začaly stejné měřicí karty vyrábět i jako externí karty (samostatně nefunkční), připojitelné převážně přes rozhraní USB.

Každá měřicí karta (vnitřní nebo externí) obsahuje specifické měřicí funkce, na které lze přistupovat z vytvořené aplikace pomocí přístrojových ovladačů. Měřicí karta pak může sloužit například k měření analogových signálů, ke generování průběhů napětí, zpracování digitálních signálů atd. Karty mohou mít jednu danou funkci nebo i více, případně „všechny“, takové karty se pak nazývají **multifunkční měřicí karty**.

Techniky synchronizace a řízeného spouštění se velmi často používají v sofistikovaných měřeních, kde jeden či více DAQ procesů souvisí s dalšími. Takový způsob kombinace je běžný v aplikacích, kde jedno zařízení pracuje jako tzv. master (generuje synchronizační signály) a druhé zařízení pracuje jako tzv. slave (čeká na synchronizační signály).

Sběrnice RTSI (Real-Time System Integration) je určena pro sdílení a výměnu časových a řídicích signálů mezi více měřicími kartami. RTSI je speciální rychlá digitální sběrnice navržená pro usnadnění systémové integrace jednotlivých částí měřicího systému. Na obrázku 2 je znázorněn příklad zapojení pěti karet pomocí prodlouženého RTSI kabelu.



Obrázek 2 | RTSI sběrnice použitá pro synchronizaci PCI karet (National Instruments).

Funkčnost RTSI závisí na typu propojené karty. Systém PXI používá sběrnici PXI trigger, která obsahuje i sběrnici RTSI a je zavedena do každého slotu v rámu. Externí zařízení můžou používat podobně digitální linky PFI (Programmable Function Interface) na svém konektoru.

3. Využití virtuální instrumentace v jaderné fyzice

V nedávné době bylo a dnes je publikováno mnoho vědeckých prací, které se zabývají prováděním experimentů v jaderné fyzice, a v několika z nich bylo úspěšně využito LabVIEW. V DSP systému [1] kompletně postaveném na využití LabVIEW je využita technika virtuální instrumentace při vývoji systému, který provádí měření v jaderné spektroskopii, jako jsou amplitudové a časové analýzy. Systém je založen na kartě vysokorychlostního digitálního osciloskopu, který zpracovává data ze dvou simultánně vzorkovaných měřicích kanálů a je dostatečně rychlý pro zachytávání impulzů z různých typů jaderných detektorů. Uvedený systém je vhodný pro aplikace měření časové koincidence, kde se používají dva měřicí kanály pro detekci počátečních a konečných jaderných událostí (start/stop). Koncept virtuální instrumentace byl také použit při vývoji tzv. plně-LabVIEW řízeného Mössbauera spektrometru [2, 3]. Tento systém je založen na jevu jaderné rezonanční absorpce a emise záření γ .

3.1. Zpracování signálu z detektoru – digitalizace

Základní součástí každého přístroje pro detekci, měření a analýzu ionizujícího záření je čidlo záření neboli **detektor**, který převádí základní parametry detekovaného záření na elektrický signál, který se po náležitém zpracování (zesílení a tvarování) vyhodnotí ve vyhodnocovací části systému. Dalším zpracováním a vyhodnocením signálu lze získat důležité informace o zkoumaném záření, a to jak po kvalitativní, tak po kvantitativní stránce. Elektronický detektor využívá určité detekční médium ke generování elektrického signálu, projde-li jím ionizující záření. Z parametrů výsledných signálů (proudu, náboje, četnosti impulzů, amplitudy impulzů, okamžiku výskytu impulzu a tvaru impulzu) lze usuzovat na charakteristické vlastnosti analyzovaného záření (ionizační účinky, hustota toku částic, jejich energie, vzájemná časová korelace a druh).

Existuje mnoho typů spektroskopií různých druhů záření, jako je záření γ , rtg záření, spektroskopie částic (alfa, elektrony, protony, neutrony atd.), hmotnostní, časová a další, které využívají různé vlastnosti záření ke studiu materiálů a částic. Dnes je možné každé takovéto spektroskopické měření provádět za použití DSP technik. Rozdíly pak spočívají zejména v typu použitého detektoru a celkovém (nadřazeném) procesu analýzy dat. Standardní struktura DSP spektroskopického systému záření γ je zobrazena na obrázku 3. DSP algoritmy nahrazují analogové moduly.



Obrázek 3 | Blokový diagram standardního DSP spektroskopického systému.

Každý DSP systém musí používat nějaké zařízení pro přímou digitalizaci analogového signálu z detektoru. Rychlý digitální osciloskop (digitizér) zaznamenává výstupní signál z detektoru ionizujícího záření buď ve formě neupraveného signálu, nebo může zpracovávat impulzy procházející přes signálový zesilovač nebo jiný předzpracovávající modul. Jednotlivé impulzy ve zpracovávaném signálu představují registraci jaderných událostí (detekovaných pomocí detektorů) a amplitudy impulzů obecně závisí na detekované energii.

Procesy zpracování signálů se provádějí digitálně a existují dva hlavní způsoby. Prvním způsobem je vzorkování dat (a přenos) digitálním osciloskopem a jejich zpracování DSP programovým kódem. Druhým způsobem je vzorkování dat a jejich zpracování programovatelným hardwarem (nejčastěji s FPGA polem) s implementovanou DSP technikou. Dnes se velmi často používají komerční digitizéry buď ve formě zásuvné karty do počítače (modulu do modulárního systému), nebo jako stolní přístroj propojený s počítačem přes rychlé komunikační rozhraní.

Diskriminační vlastnosti digitizéru jsou funkcí vzorkovací rychlosti (S/s) a rozlišení analogově digitálního převodníku (bit). Nízké 8bitové energetické rozlišení se většinou používá u velmi rych-

lého vzorkování, v řádech až GS/s. Použitá vzorkovací frekvence k digitalizaci výstupního signálu z detektoru pak závisí na použitém typu detektoru. Vzorkovací frekvence s rychlostmi okolo 100 MS/s jsou považovány za dostatečně vysoké pro záznam impulzů z detektorů při zachování optimální diskriminace impulzu a zabránění podvzorkování a zkreslení signálu. Tedy pro většinu aplikací je časové rozlišení 10 ns dostatečné pro provádění běžných časových měření, například měření doby života a jiné koincidenční metody.

Dnes už jde jednoduše současně zvýšit energetické i časové rozlišení pomocí rychlých digitizérů nebo více pokročilými DSP technikami. Nevýhodou zvyšování vzorkovací frekvence, energetického rozlišení nebo mnohem robustnější DSP techniky je možné zvyšování mrtvé doby spektrometru vlivem přenosu dat a jejich zpracování, čímž může dojít k celkovému snížení čítecí rychlosti. V pracích [4, 5] je řešena problematika snižování mrtvé doby Mössbauerova spektrometru zaváděním paralelizace provádění DAQ a DSP procesů [4], tak i optimalizací DSP kódu pro analýzu signálu z detektoru [5].

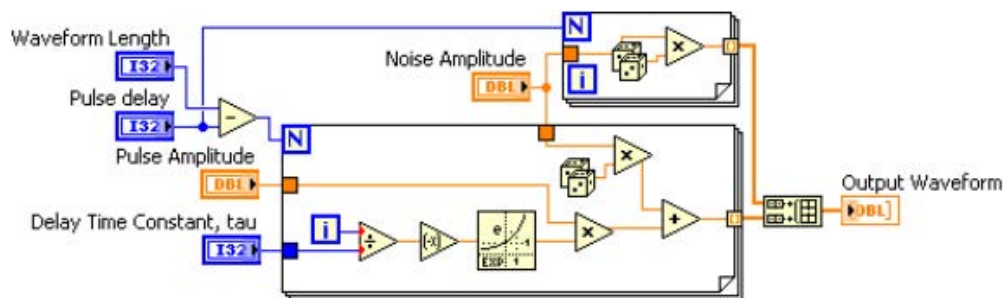
3.1.1. Simulace generování impulzů

Generování a zpracování různých typů impulzů představuje nejvíce úloh jaderné elektroniky. Prostředí LabVIEW nabízí řadu standardních funkcí pro generování standardních tvarů průběhů (impulz, rampa, sin, sinc atd.) a další průběhy lze jednoduše vytvořit z těchto funkcí či pomocí vlastních algoritmů. Čas se zde simuluje ve formě čísla vzorku (pořadí) v generovaném průběhu a výstup je ve formě pole hodnot (1D, řada) různé amplitudy podle simulovaného průběhu. Jednoduše se zde také simulují zašuměné průběhy.

Simulaci generování impulzů z detektoru v aplikaci běžící na počítači lze provést na základě známých rovnic popisujících tvar impulzu. Tyto rovnice se přepíší do algoritmu v kódu vývojového prostředí, včetně rovnic pro případně další obvody, které se používají při zpracování signálů z detektoru (předzesilovače, tvarovače, diskriminátory apod.). Impulz simulující výstup z klasického detektoru lze generovat pomocí kódu zobrazeného na obrázku 4, čelní panel tohoto programu je na obrázku 5. Uvedený kód generuje impulz s určitou délkou průběhu, zpožděním, amplitudou a časovou konstantou pro exponenciální vybíjení. Hodnota zpoždění zde určuje velikost nulového (šumového) pole generovaného cyklem. Další částí jsou hodnoty nenulových vzorků i dány vztahem

$$a_i = Ae^{-\frac{i}{\tau}}, \quad (1)$$

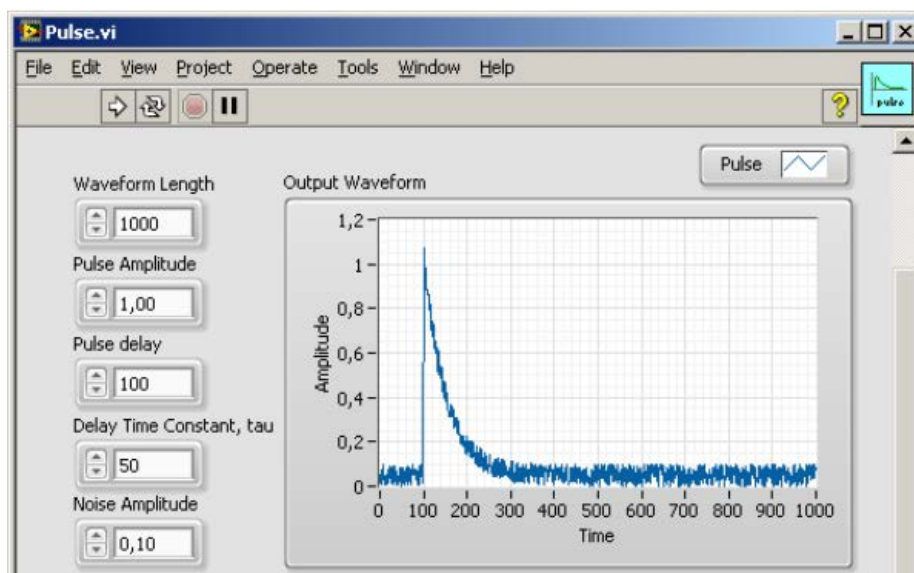
kde A je amplituda impulzu a τ je konstanta doby doběhu. Výsledné pole z exponenciálního cyklu je spojeno se zpožďovacím polem, čímž se vytvoří finální výstupní průběh, který lze zpracovávat.



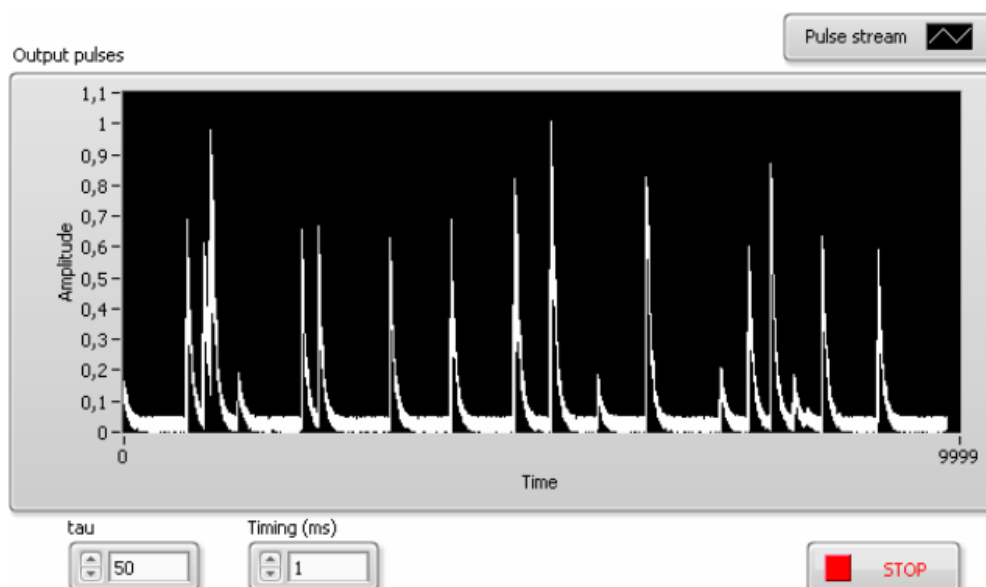
Obrázek 4 | Kód pro simulaci generování impulzu.

Program je koncipován k použití ve formě podprogramu v nadřazeném programu. Náhodné hodnoty pro každý parametr impulzu lze nastavit použitím funkce generátoru náhodných čísel. Pro opakované generování impulzů lze podprogram začlenit do programové smyčky s vhodným časováním, takže lze simulovat také velikost aktivity zářiče a testovat zatížitelnost dalších funkcí zpracovávajících signál pomocí DSP funkcí.

Další program simulující **kontinuální generování impulzů** je použitelný při testování vyvinutých algoritmů pro zpracování impulzů z detektorů bez nutnosti pracovat s radioaktivním zdrojem. Čelní panel je znázorněn na obrázku 6. Základem je algoritmus generování impulzu s náhodnou amplitudou v náhodném čase po předchozím impulzu.



Obrázek 5 | Simulace generování impulzu.



Obrázek 6 | Simulace kontinuálního generování impulzů.

3.1.2. Základní zpracování impulzů

Digitálně implementované funkce zpracování signálu (tvarování, filtrace, určování platnosti impulzu, měření energie a času, analýza tvaru impulzu, redukce šumu, potlačení superpozice impulzů, MCA atd.) může poskytnout jeden DSP systém pro různé druhy detektorů.

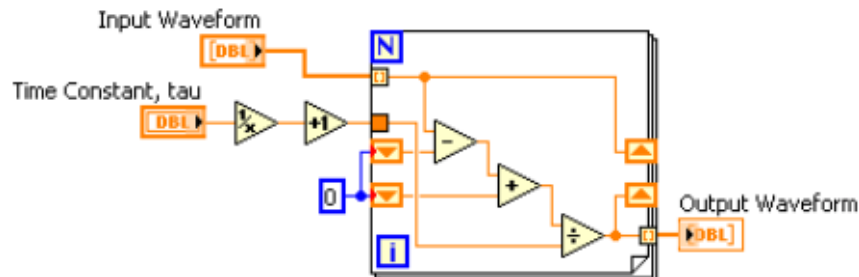
Metody tvarování impulzů se používají pro zvýšení poměru signál/šum a také ke zvýšení rozlišení páru blízkých impulzů. V případě jaderných detektorů – je-li použit vysoce aktivní zářič a detektor s dlouhou dobou vybíjení (dosvitu) – se může stát, že dvě a více událostí splyne v jednu, která je tak zaznamenána a chybně vyhodnocena. Pro detekci, korekci nebo potlačení těchto impulzů se používají různé metody. Efekt superpozice ovlivňuje čítecí rychlost a energetické i časové rozlišení spektroskopického systému. Pro potlačení efektu superpozice je také možné použít rychlé detektory, v tomto případě je ale nutné použít také rychlé DSP systémy. Nové DSP algoritmy se používají také pro optimální filtraci, určení času náběhu a vhodnou korekci šumu.

V praxi se nejčastěji tvaruje různými derivačními a integračními obvody (tzv. CR-RC filtry), zpožďovacími linkami a dalšími speciálními obvody. V DSP technice lze CR-RC filtraci provádět použitím diferenční aproximace pro diferenciální rovnice s popisem simulovaného obvodu

rezistor – kondenzátor. Pro diferenční CR část lze tento vztah popsat výrazem

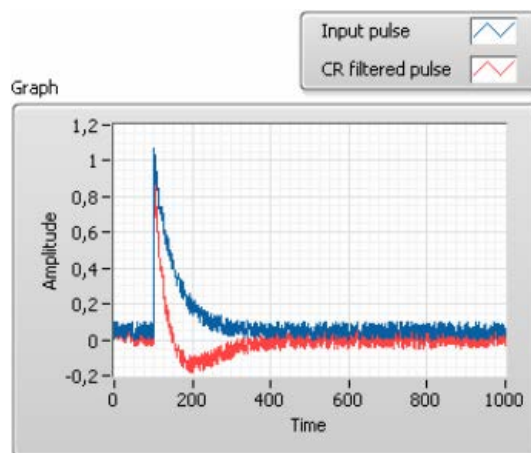
$$y(k) = \frac{1}{1 + \frac{1}{\tau}} [y(k-1) + (x(k) - x(k-1))], \quad (2)$$

kde $\tau = C \cdot R$ je časová konstanta, x a y jsou navzorkované vstupní a výstupní průběhy, a k a $k-1$ jsou pořadnice pro dva po sobě jdoucí vzorky. LabVIEW kódem lze tento CR filtr implementovat blokovým diagramem z obrázku 7. Posuvný registr je zde použit pro vytvoření hodnot $x(k)$ a $y(k)$ na konci dané iterace a jako $x(k-1)$ a $y(k-1)$ pro další iteraci algoritmu uvnitř cyklu.



Obrázek 7 | Blokový diagram programu založeného na rovnici implementující diferenční CR filtraci pro tvarování impulzu.

Obě hodnoty $x(k)$ a $y(k)$ jsou inicializovány nulou (počátečně vynulovány). Vliv CR filtru na tvar vstupního impulzu je znázorněn na obrázku 8. U všech funkcí je zde k vlastnímu signálu přidán šum pro simulování zašuměného vstupu.



Obrázek 8 | Vliv CR filtru na tvar impulzu.

V praxi se většinou používají prvky s větším počtem CR a RC členů, které výrazněji ovlivňují tvar impulzů a zlepšují následné zpracování a analýzu.

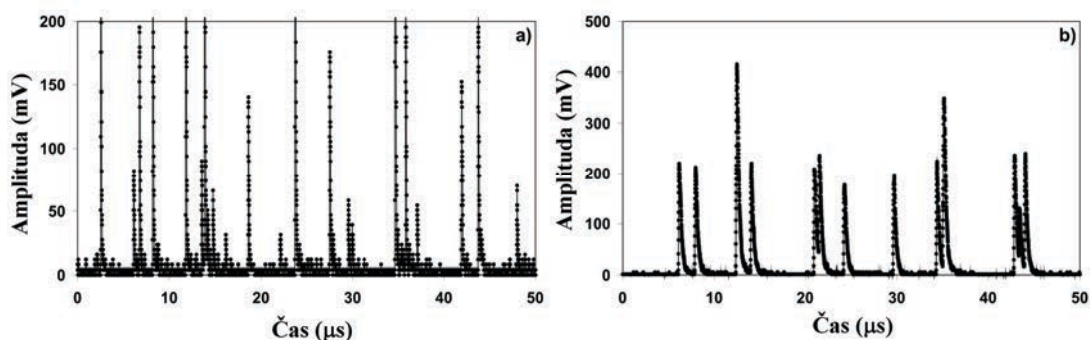
Počítačem řízený funkční generátor lze využít v simulačních úlohách pro generování přesných signálů nutných pro odzkoušení navržených algoritmů a upravovacích obvodů.

Digitální osciloskopy se používají ke snímání analogových signálů, jejich zobrazení a přenosu v digitální formě do aplikace. Některé výkonné osciloskopy mají i vlastní vestavěné zpracování signálů s různými DSP funkcemi. Pomocí moderních digitizérů je také možné provádět speciální spouštěcí a synchronizační techniky. Tyto techniky umožňují aplikovat velmi sofistikované DAQ metody, ve kterých může impulz z detektoru přímo spouštět další DAQ proces. V práci je prezentováno převážně použití technické a programové podpory pro přístrojové ovladače NI-SCOPE a vysokorychlostní digitizéry firmy NI. Přístrojový ovladač NI-SCOPE je sada softwarových podprogramů, které umožňují ovládat a programovat zařízení. Každý podprogram odpovídá programové operaci, jako je konfigurace, čtení, zápis a spouštění přístroje. Při tvorbě blokového diagramu je nutné dodržet několik pravidel a doporučení [6]).

3.2. Zpracování, tvarování a měření amplitudy impulzů

Navržené DAQ procesy jsou níže demonstrovány na signálech získaných ze scintilačních detektorů postavených na fotonásobiči (PMT – photomultiplier tube) s běžným NaI:Tl scintilátorem dvou různých tloušťek, rychlém scintilátoru YAP:Ce a pomalém plynovém proporcionálním čítači (GPC – gas filled proportional counter) [1].

Scintilátor NaI:Tl má vysokou světelnou výtěžnost a relativně dlouhou dobu dosvitu 230 ns. Scintilátor YAP:Ce má mnohem menší světelnou výtěžnost (48 % v porovnání s NaI:Tl) a krátkou dobu dosvitu 28 ns a je vhodný pro detekci záření γ nízkých energií. Optimální tloušťka pro nízké energie záření γ 14,41 keV (emitované radioaktivním zdrojem ^{57}Co) je 0,15 mm pro scintilátor NaI:Tl a 0,35 mm pro YAP:Ce. Vysokoenergetický detektor záření γ je komerční detektor (Scionix) se scintilátorem NaI:Tl o tloušťce 51 mm a průměru 38 mm. Plynový detektor GPC je plněný směsí xenon/metan a je vhodný zejména pro detekci rtg záření. Výstupem detektorů je impuls s amplitudou dostatečně velkou pro změření digitálním osciloskopem. Na obrázku 9 jsou ukázány zesílené signály (analogovým zesilovačem) ze dvou detektorů se scintilátorem a) YAP:Ce a b) silným NaI:Tl. Signály jsou získány se zářičem ^{57}Co a vzorkovací rychlostí 200 MS/s.

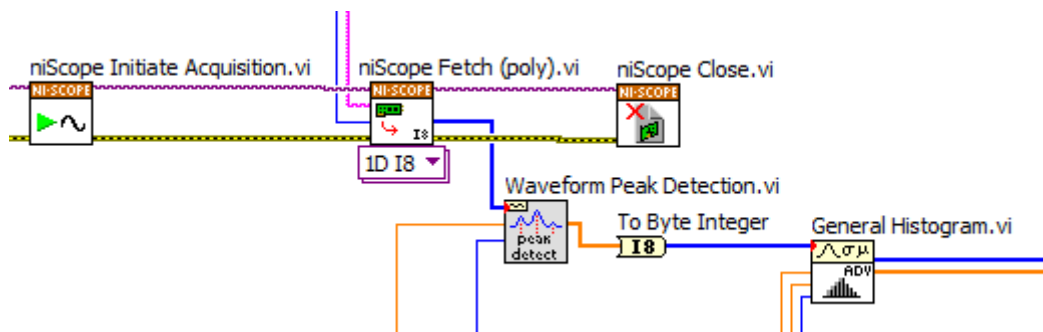


Obrázek 9 | Signály z detektorů s a) YAP:Ce (14,41 keV) a b) silným NaI:Tl (122,06 keV) scintilátorem.

Základní metodou analýzy impulzů přicházejících z detektoru (detekční části systému včetně případných analogových upravovacích obvodů) je jejich **amplitudová analýza**. Tato analýza slouží k určení energie registrovaných fotonů nebo částic a jejich následné charakterizaci.

DSP amplitudová analýza realizovaná v LabVIEW může být založena na LabVIEW funkci Waveform Peak Detection VI (dále označována jako WPkD). Proces amplitudové analýzy je zde řízen několika vstupními parametry funkce WPkD a hodnoty amplitud detekovaných píků jsou pak použity pro amplitudovou analýzu [7, 8].

Funkce WPkD vyhledává umístění (pozice) píků, určuje velikost amplitudy a hodnotu druhé derivace píků ve vstupním signálu. Funkce WPkD je softwarový ekvivalent elektronického pulzně výškového analyzátoru, kdy optimální zpracování signálu z různých detektorů je realizováno pomocí DSP. Implementace funkce WPkD v blokovém diagramu je znázorněna na obrázku 10.



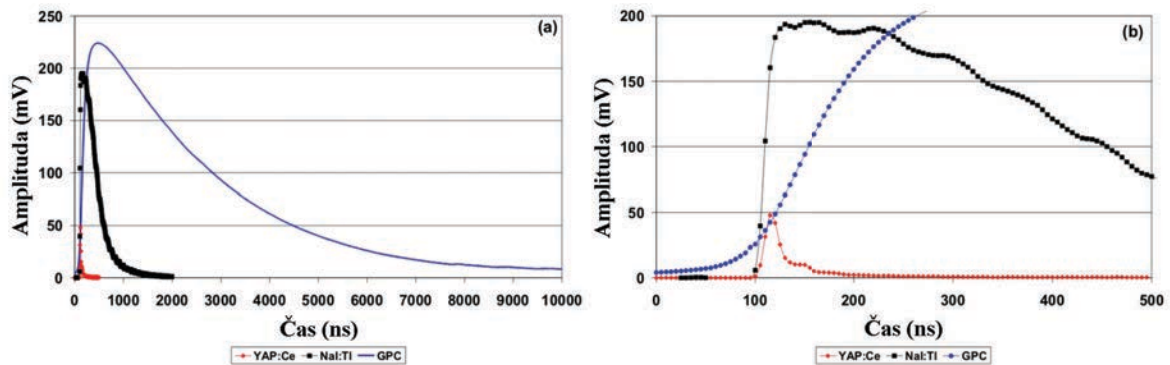
Obrázek 10 | Implementace funkce WPkD.

Změnou vzorkovací rychlosti a pomocí změny parametrů prahu a šířky pro určení platnosti píku (impulzu v signálu) ve WPkD lze jednoduše provádět potlačení detekce neplatných píků a jejich čítání v následných algoritmech. Nicméně funkce WPkD neprovádí korekci superpozice

impulzů ani její potlačení, funkce sice většinou rozliší dva sečtené impulzy (případně i více), ale jejich amplitudy nejsou opravené. Pro tyto aplikace je žádoucí použít vhodnější algoritmy. Tyto a některé další nevýhody uvedené funkce při použití zejména pro rychlé zpracování signálů jsou popsány v pracích [1,5,7], kde byly provedeny další úpravy nebo nové DSP algoritmy.

3.2.1. Amplitudový analyzátor

Hlavní částí zde představovaného systému je komerční digitizér NI PCI-5124. Vyvinutá aplikace provádí všechny DSP funkce. Tento digitizér byl také použit v γ -spektroskopii vysokorychlostních událostí a v návrhu Mössbauerova spektrometru [3]. Je zde použit radioaktivní zářič ^{57}Co a signály z detektoru se zesilovačem jsou vzorkovány rychlostí 200 MS/s. Na obrázku 11 jsou znázorněny tvary impulzů ze tří vybraných detektorů.



Obrázek 11 a) Impulzy pro energii 14,41 keV z detektoru se scintilátorem YAP:Ce (červená) a plynového GPC (modrá) a impuls pro energii 122,06 keV z detektoru se silným scintilátorem NaI:Tl (černá), b) detaily náběžných hran těchto impulzů.

Nejčastěji používanou DSP metodou je pulzně výšková analýza prováděná uvnitř mnohakanálového analyzátoru (MCA), který zaznamenává počet impulzů stejné amplitudy do každého kanálu. V MCA odpovídá číslo kanálu velikosti amplitudy impulzu a průběžně se zde ukládá histogram četností těchto velikostí. Jedno možné řešení DSP-MCA bylo vytvořeno a výkonnost tohoto systému byla testována v [1] s detektory velmi krátkých impulzů od 40 ns do několika mikrosekund a v rozsahu nízkých i vysokých energií záření rtg a γ . Čelní panel hlavní aplikace je ukázán na obrázku 12, kde jsou zpracovávány záporné impulzy.

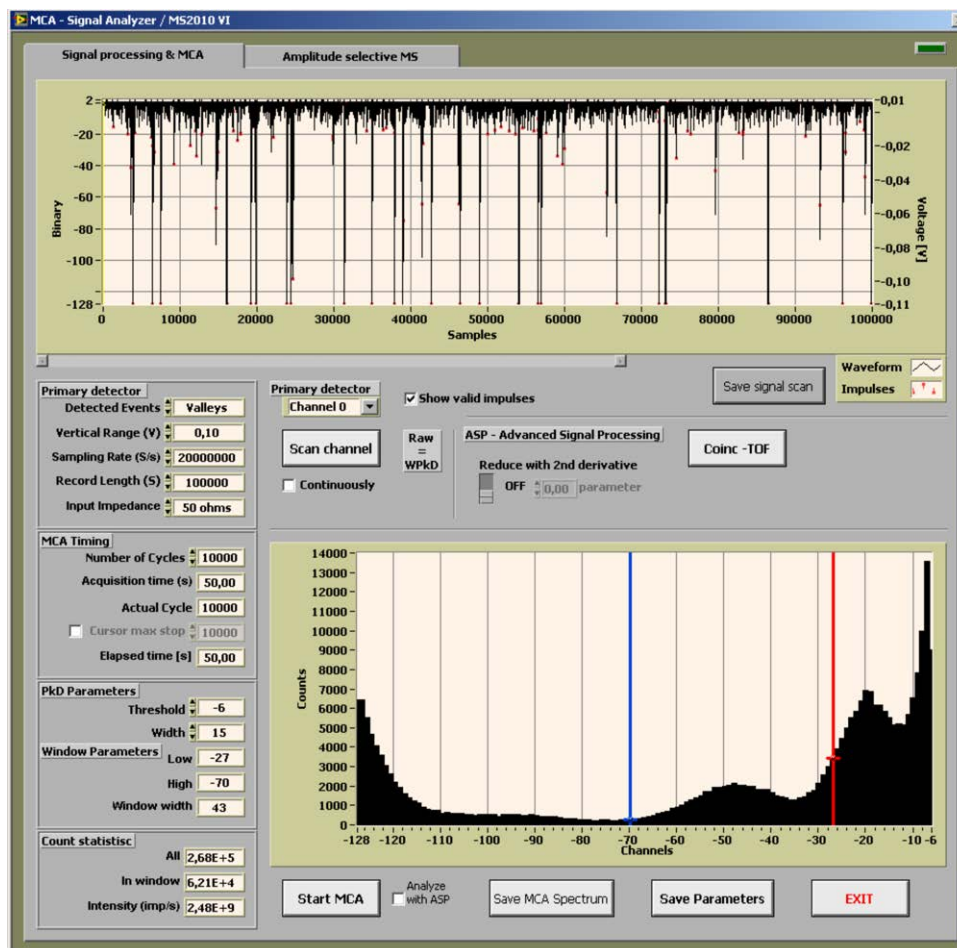
Další modul, nazývaný **diskriminátor**, sleduje, jestli nepřesáhne signál určitou hladinu, a případně vygeneruje na výstupu digitální signál. Dva diskriminátory s různými hodnotami pak mohou nastavit tzv. diskriminační okno. Modrý a červený kurzor v okně MCA (obrázek 12) lze použít pro vyčlenění a analýzu impulzů vybraného energetického rozsahu. Tyto kurzory lze také použít jako diskriminační úrovně pro další zpracování například v Mössbauerových spektrometrech.

3.2.2. Vliv vysoké vzorkovací rychlosti

V [1,6] je prezentovaná práce prováděná na čtyřech různých detektorech a dvou zdrojích záření γ . Pro každý detektor byla změřena MCA s určením hlavního fotopíku ve spektru. K dříve používanému zdroji ^{57}Co byl zde navíc použit zářič ^{137}Cs (záření γ 662 keV). Spektra MCA byla měřena v konfiguraci s detektorem, signálovým zesilovačem, digitizérem a analyzována pomocí DSP kódu s funkcí WPKD.

V prvním kroku byl signál z detektoru vzorkován nízkou vzorkovací rychlostí (10 MS/s) pro odhad standardních hodnot systému. Pro rychlá měření dob života (jaderných hladin) je nutné používat maximální vzorkovací rychlosti. Dále byly provedeny analýzy pro odhad vlivu na tvar MCA spektra (energetické rozlišení). Energetická spektra rtg a záření γ emitovaná zdroji ^{57}Co a ^{137}Cs jsou uvedena na obrázku 13. V druhém kroku tedy byla zvolena vzorkovací rychlost 200 MS/s.

Obrázek 13 znázorňuje vylepšení energetického rozlišení pro všechny fotopíky kromě detektoru GPC, u kterého není vidět výrazné zlepšení. Lze říci, že pro rychlé detektory a vysoké energie (i extrémně nízké úrovně signálů) je vylepšení MCA s vysokou vzorkovací rychlostí markantnější díky lepšímu rozlišení náběžné hrany pozorovaného impulzu a maximální úrovně signálu [1].



Obrázek 12 | Signálový a mnohakanálový analyzátor – čelní panel.

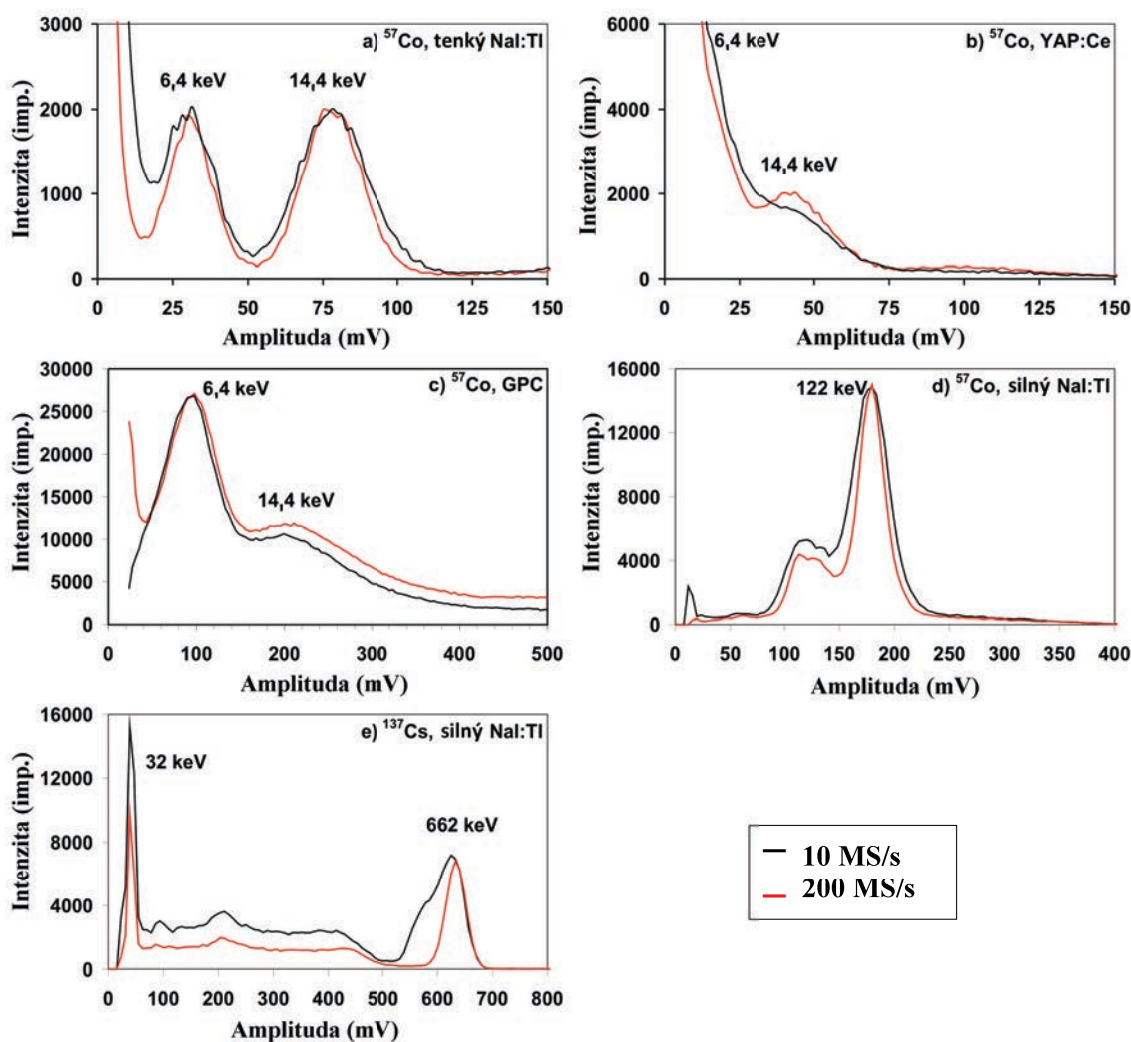
3.3. Koincidenční techniky

V běžných jaderných koincidenčních systémech se při studiu rozpadů radioaktivních látek používají dva rozdílné detektory pro detekci fotonů (případně částic) různých energií.

Systém prezentovaný v článku [1] je vhodný pro měření jaderných koincidencí, jako je určování poločasu života excitovaných stavů jaderných hladin, kde je zapotřebí dvou vstupních kanálů DAQ zařízení. První kanál může sloužit k detekci „start“ počátečních jaderných událostí a druhý kanál detekuje „stop“ události. Oba kanály používají nejvyšší vzorkovací rychlost. Jsou-li analyzovány krátce žijící excitované stavy, hodnoty času příletu fotonu/částice (TOF – time-of-flight) do detektoru musí být určeny s nejvyšší přesností. Vzorkovací rychlost 200 MS/s je zde použita pro přesný záznam MCA a časových měření a systém je tedy citlivý na rozpadové časy od desítek nanosekund. Na obrázku 14 je znázorněn blokový diagram diskutovaného systému.

Časová přesnost tohoto měřicího systému závisí na vlastnostech detektoru a typu elektroniky zpracovávající signál. Pro získání přesné TOF hodnoty existuje několik „analogových“ časových metod implementovaných v DSP (v anglické terminologii označované jako leading edge timing, crossover timing, constant-fraction timing, first photoelectron timing). V jedné z nich je startovací čas impulsu interpolován ze vzorků náběhu impulsu a digitální diskriminátor náběžné hrany (LED – leading-edge discriminator) určuje TOF hodnotu, která pak představuje čas, ve kterém úroveň impulsu překročila danou diskriminační hladinu. Metoda LED je jednoduše implementovatelná a vhodná zejména pro tvarově podobné impulsy vyskytující se v signálovém záznamu. Vyvinutý DSP systém s technikou TOF-LED může být tedy použit pro různé typy detektorů. Popis řešeného LabVIEW LED je uveden v práci [1], kde byl proveden vývoj algoritmu TOF i jeho aplikace v koincidenčních měřeních. Kód musí rozeznat pozici maximální hodnoty v impulsu (amplitudová analýza) a bod počátku impulsu.

Jak bylo uvedeno výše, při použití kódu s původní WPKD funkcí se rozeznají platné píky. Bohužel při použití vysoké vzorkovací rychlosti vystanou problémy a je tedy nutné vylepšit algorit-



Obrázek 13 | MCA spektra zdroje ^{57}Co pro a) tenký NaI:Tl, b) YAP:Ce scintilátory, c) plynový čítač GPC, d) silný NaI:Tl scintilátor, a e) zdroje ^{137}Cs pro silný NaI:Tl scintilátor. Signál je zpracováván se vzorkovacími rychlostmi 10 a 200 MS/s.

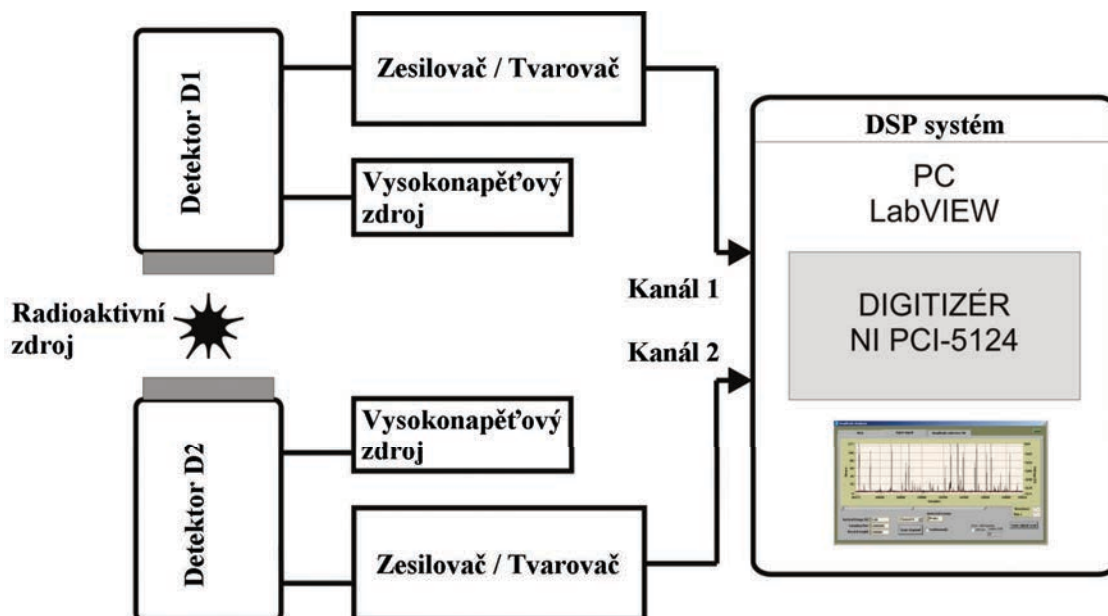
mus zde označovaný jako DSP-TOF. Bylo pozorováno, že při vysokorychlostním vzorkování jsou nalezené pozice pík (výstup WPkD) občas mimo maximální hodnotu (vzorek) v impulsu. Tento chybový posun pak negativně ovlivňuje přesnost časových měření a musí být potlačen modifikací algoritmu s WPkD určením TOF.

Na obrázku 15 je uveden LabVIEW kód DSP-TOF algoritmu, který opravuje vypočítanou amplitudu impulsu WPkD funkcí (zpravidla podhodnocenou) a zároveň nalezne hodnotu TOF impulsu metodou LED. TOF pak značí pořadí prvního vzorku impulsu nad zadaným prahem během zadané šířky (počtu bodů).

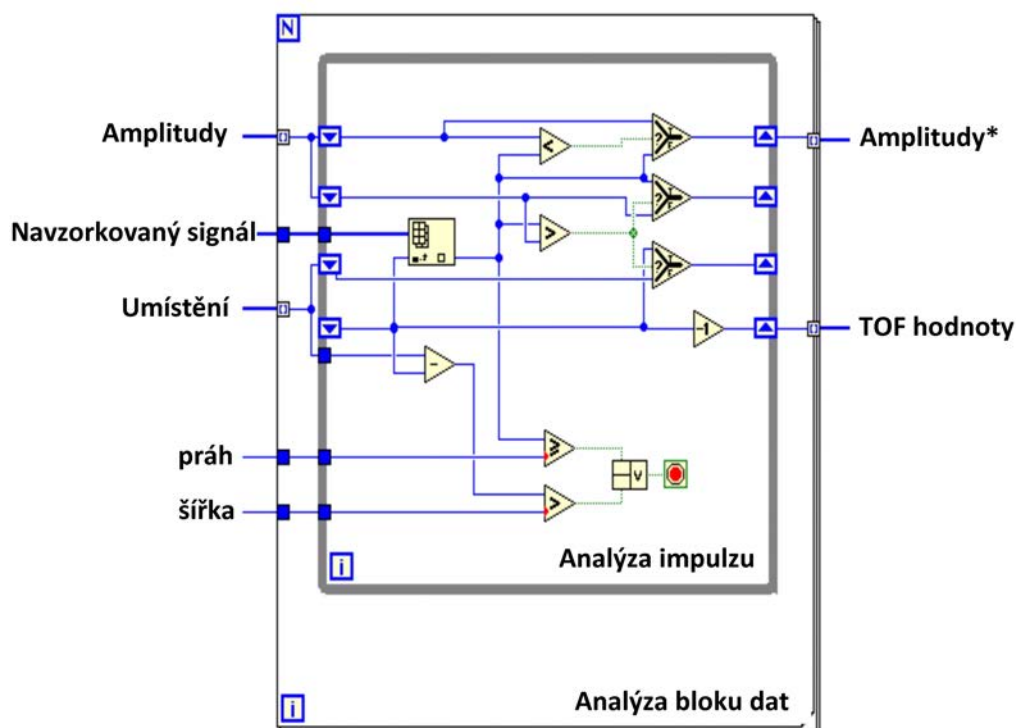
3.3.1. Měření doby života

Typické použití uvedeného systému je v koincidenčních měřeních, kde lze dobu života excitovaného stavu měřit registrací rozpadových kaskád typu $\text{rtg}-\gamma$ nebo $\gamma-\gamma$. V [1] je prezentováno měření doby života excitovaného stavu ^{57}Fe 14,41 keV zdroje ^{57}Co , který se rozpadá elektronovým záchytem na excitovaný stav ^{57}Fe (136,47 keV), který se dále deexcituje přes stavy 122,06 keV a 14,41 keV na základní stav. Excitovaný stav 14,41 keV má poločas přeměny 98,3 ns.

V souvislosti s obrázkem 14 první detektor (D1) detekuje 122,06 keV fotony γ (tlustý NaI:Tl) jako *start* události a druhý detektor (D2) detekuje 14,41 keV fotony γ (YAP:Ce nebo tenký NaI:Tl) jako *stop* události. Koincidenční intervaly, vypočítané pomocí TOF kódu, jsou pak akumulovány do histogramu. Každý kanál DSP systému byl konfigurován individuálně pro detekci správných start a stop událostí. Hodnota poločasu přeměny byla určena na $98,9 \pm 0,3$ ns.



Obrázek 14 | DSP systém pro časovou jadernou spektroskopií.



Obrázek 15 | Algoritmus pro výpočet TOF hodnoty u nalezeného impulsu.

3.4. Další techniky virtuální instrumentace používané v jaderných systémech

Zpracování signálu z různých detektorů je v jaderných (obecně spektrometrických) systémech nejběžnější proces. K tomu se ale v různých systémech používají další techniky/metody. Například jednou metodou může být generování analogového signálu (průběhu) pro řízení určité části systému. Tím také může vzniknout potřeba správné synchronizace tohoto procesu s procesem digitalizace signálu z detektoru [6].

Pro generování signálů se používají různá „výstupní“ analogová zařízení. V habilitační práci je popsán funkční generátor s jeho přístrojovými ovladači – modul NI PCI-5401 (12bitový, obnovovací rychlost 40 MS/s). Přístrojové ovladače NI-FGEN se používají pro tvorbu aplikací s NI 5401

a tzv. Soft Front Panel (SFP) aplikaci lze jednoduše použít pro interaktivní generování průběhů pomocí modulů signálových generátorů, stejným způsobem jako klasické stolní přístroje.

Spouštěcí signál je signál, který spouští jednu nebo více dalších funkcí systému. Základní typy těchto signálů jsou digitální, softwarový nebo analogový a lze je navázat (odvodit) na atributy zpracovávaných signálů jako třeba úroveň a sklon signálu. Spouštěcí signály dále mohou být vnitřní (softwarově generované) nebo vnější, externí. Externí umožňují synchronizovat práci hardwaru s externím obvodem nebo zařízením. Existuje několik typů a každý z nich používá různé funkce NI-SCOPE nebo NI-FGEN typu `Configure Trigger`. Nejvíce se využívá sběrnice RTSI, popsána v dřívější části.

Tak například v počítačem řízeném modulárním Mössbauerově spektrometru [2, 3] jsou dvě hlavní části, počítač s NI 5102 digitizérem a NI 5401 funkčním generátorem. Obě karty (PCI i PXI) jsou vzájemně propojeny právě pomocí sběrnice RTSI (PXI Trigger).

4. Mössbauerova spektroskopie

Mössbauerova spektroskopie umožňuje určit a kvantifikovat fázové složení látek (amorfní, nano-krytalické); dále umožňuje určit valenční a spinové stavy zkoumaných atomů, rozlišit strukturní pozice atomů, určit magnetické stavy a lokální konfiguraci magnetických momentů atomů; určit magnetické vlastnosti zahrnující teplotní a magnetické přechody; studovat mechanismy a kinetiky reakcí v pevné fázi, fázové transformace. Lze také měřit teplotní a polní závislosti těchto vlastností. Jedná se o analytický nástroj pro výzkum materiálů obsahujících specifická jádra (především Fe a dále Sn, Au, Ni, Zn, Eu ...) formou lokální sondy jejich bezprostředního okolí. Mössbauerova spektroskopie je výrazně prvkově selektivní a umožňuje identifikovat požadované složky, i když se v materiálu vyskytují ve velmi malém množství.

Použijí-li se při studiu například kryostaty nebo vysokoteplotní pícky, je možné analyzovat vzorky za různých podmínek, jako třeba za nízkých teplot (například od 1,5 do 300 K) a za vysokých teplot (například až do 1 000 °C, s možností volby reaktivní nebo inertní atmosféry), nebo aplikovat vnější magnetické pole (například až do 8 T, v režimu nízkých teplot) [9]. Vzorky mohou být jak ve formě prášku, tak tenkých vrstev či plátek. Je-li potřeba analyzovat větší a objemné vzorky, které například nelze „zničit“, je výhodné použít nějakou mössbauerovskou metodu s odrazovou geometrií.

4.1. Mössbauerův jev

Mössbauerův jev je založen na bezdrazové jaderné emisi a rezonanční absorpci záření γ ve vzorku. Záznam Mössbauerových spekter je založen na měření intenzity záření γ společně s přesným kontrolovaným pohybem radioaktivního zdroje. Jako Mössbauerovo spektrum je označována energetická závislost absorpce záření $G(E)$.

Teorie Mössbauerova jevu popsána v habilitační práci, kde jsou uvedeny vybrané charakteristiky důležité pro popis principu a konstrukce spektrometrů. Podrobně je Mössbauerův jev popsán v mnoha publikacích.

K experimentálnímu měření Mössbauerova spektra se využívá modulace energie emitovaného záření γ pomocí Dopplerova jevu. Pohybuje-li se zářič vůči vzorku (detektoru) rychlostí v , pak se energie E_γ emitovaného fotonu posune o hodnotu

$$\Delta E = E_\gamma \frac{v}{c} \cos \alpha, \quad (3)$$

kde c je rychlost světla, α je úhel mezi směrem rychlosti pohybu a směrem emise fotonu záření γ . Takovým způsobem se mění překrytí emisní a absorpční čáry a můžeme tedy měřit velikost rezonanční absorpce záření γ .

Uživatelsky výhodné je pak vyjadřovat změnu energie v jednotkách rychlosti mm/s. Pro převod na energetické jednotky se při měření na izotopu ^{57}Fe používá podle (3) převodní faktor

$$1 \text{ mm/s} \equiv 48,1 \cdot 10^{-9} \text{ eV}. \quad (4)$$

Pro ^{57}Fe je **přirozená šířka čáry** $\Gamma_0 = 0,097 \text{ mm/s}$ a potřebné rozsahy rychlostí pohybu leží v intervalu od setin do desítek mm/s. Minimální teoretická šířka spektrální čáry transmisního měření Mössbauerova spektra je (pro ^{57}Fe) rovna $2\Gamma_0 \approx 0,194 \text{ mm/s}$. **Mössbauerovo spektrum**

pak zobrazuje intenzitu průchodu rezonančního záření γ absorberem (v transmisní geometrii měření) při dané vzájemné rychlosti pohybu zářiče vůči absorberu. Kladná rychlost odpovídá vzájemnému přibližování zářiče a absorberu, záporná jejich vzdalování. Minimum četnosti odpovídá rezonanční absorpci záření γ , která nastává při tzv. **rezonanční rychlosti** v_{rez} . Charakteristické hodnoty dvou nejpoužívanějších mössbauerovských izotopů jsou uvedeny v tabulce 1¹.

Veličina			⁵⁷ Fe	¹¹⁹ Sn
Energie přechodu	E_γ	(keV)	14,41	23,87
Poločas přeměny	$t_{1/2}$	(s)	$97,7 \cdot 10^{-9}$	$1,8 \cdot 10^{-8}$
Střední doba života	τ	(s)	$1,42 \cdot 10^{-7}$	$1,9 \cdot 10^{-8}$
Přirozená šířka čáry	Γ_0	(eV)	$4,67 \cdot 10^{-9}$	$2,4 \cdot 10^{-8}$
Energie zpětného rázu	E_r	(eV)	$1,96 \cdot 10^{-3}$	$2,6 \cdot 10^{-3}$
Poměr	E_r/Γ_0		$4,22 \cdot 10^5$	$2,8 \cdot 10^6$
Relativní šířka hladiny	Γ_0/E_γ		$3,24 \cdot 10^{-13}$	$1,01 \cdot 10^{-12}$
Převodní faktor	1 mm/s	(10^{-9} eV)	48,1	79,7
Šířka spektrální čáry	$2\Gamma_0$	(mm/s)	0,194	0,998

Tabulka 1 | Veličiny charakterizující mössbauerovské přechody v ⁵⁷Fe a ¹¹⁹Sn.

Současná experimentální technika dovoluje touto metodou registrovat efekty i na úrovni 0,1 % (pro počet registrovaných událostí při každé rychlosti řádově 10^6). Úzké spektrální čáry až 10^{-9} eV a rekordní energetické rozlišení až 10^{-13} umožnily použití Mössbauerova jevu v nejrůznějších oblastech vědy a výzkumu. Nejvíce prací je prováděno měřením na jádrech železa ⁵⁷Fe. Obsah izotopu ⁵⁷Fe v přirozené izotopové směsi je 2,119 %.

4.2. Konstrukce Mössbauerových spektrometrů

Existují různá *geometrická* uspořádání Mössbauerových spektrometrů. Transmisní Mössbauerova spektroskopie (TMS, Transmission Mössbauer Spectroscopy) se využívá k analýze vzorků procházejícím zářením, tedy v geometrii přímé, kdy jsou zářič, vzorek a detektor v jedné ose. Vzorek může být ve formě vrstvy prášku, nebo tenkého plíšku či nanesené vrstvy na podkladě neprohlcujícím záření γ požadované energie. Snahou je volit tloušťku vzorku tak, aby nedocházelo k rozšíření čáry vlivem mnohonásobného rozptylu a současně aby absorpce ve vzorku byla co možná maximální. Mössbauerova spektroskopie konverzních elektronů (CEMS, Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy) a Mössbauerova spektroskopie konverzního rentgenového záření (CXMS, Conversion X-ray Mössbauer Spectroscopy) [10] jsou dvě z metod, s jejichž pomocí lze studovat mössbauerovské záření v geometrii zpětného rozptylu (BMS, Backscattering Mössbauer Spectroscopy). Vzhledem k energetickým ztrátám během absorpce ve zkoumaném materiálu je hloubka, ze které se konverzní elektrony, resp. konverzní rentgenové záření, uvolní ze vzorku velmi malá (300 nm, resp. 1–10 μm). Tato technika je vhodná ke studiu tenkých filmů a fázového složení povrchů.

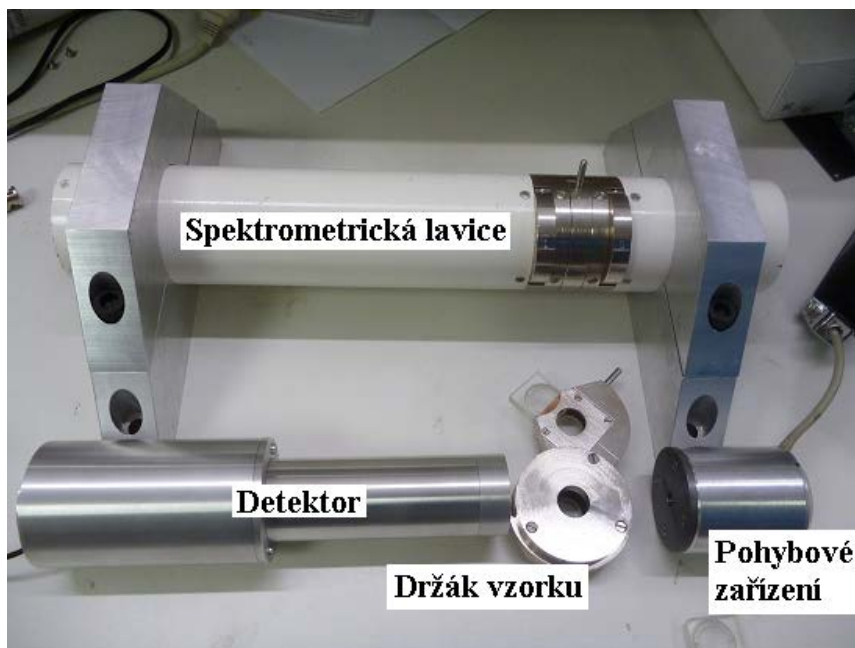
Typická spektrometrická lavice Mössbauerova spektrometru je uvedena na obrázku 16. Jedná se o lavici pro měření při pokojové teplotě v transmisním módu. Hlavními částmi jsou detektor záření γ , držák vzorku, kolimátory a pohybové zařízení. Vše je pak řízeno elektronickým řídicím systémem (zpracování a generování signálů, synchronizace).

Mössbauerovy spektrometry se podle použitého módu rychlosti dělí na **dva základní typy**: spektrometry s konstantní rychlostí a spektrometry s proměnnou rychlostí. Detailněji je rozdělení popsáno v habilitační práci.

Každý spektrometr je nutné kalibrovat z pohledu pozice nulové rychlosti a šířky jednoho rychlostního kanálu, a tedy i šířky celkového spektra (limitní rychlosti). Pro tyto účely se používají referenční (kalibrační) vzorky (tabulka 2). Nejpoužívanější je železo α -Fe, hematit α -Fe₂O₃ a nitroprusid sodíku (NPS) Na[Fe(CN)₅NO·2H₂O] s přesně známými pozicemi spektrálních čar. Kalibrační se také zjišťuje nelinearita rychlostní osy a posuzují se hodnoty šířek spektrálních čar.

Na obrázku 17 je zobrazeno Mössbauerovo spektrum kalibračního vzorku α -Fe. Některé kalibrační vzorky se také vyrábějí obohacené o izotop ⁵⁷Fe i přes 90 %.

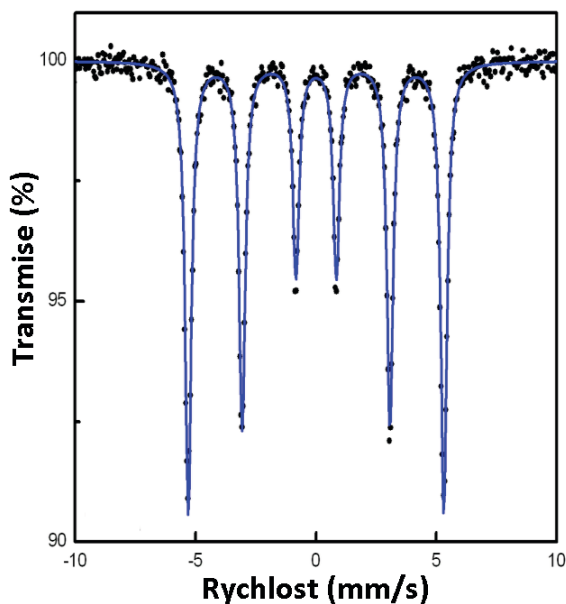
¹Hodnota poločasu přeměny vzbuzeného stavu 14,41 keV bývá uváděna i jako $98,3 \cdot 10^{-9}$ s.



Obrázek 16 | Foto spektrometrické lavice pro Mössbauerův spektrometr.

Standard	1	2	3	4	5	6
α -Fe	-5,3123	-3,0760	-0,8397	0,8397	3,0760	5,3123
α -Fe ₂ O ₃	-8,0900	-4,3299	-0,1810	1,8099	5,3299	8,6099
NPS	-1,1121	0,5895	-	-	-	-

Tabulka 2 | Pozice spektrálních čar v mm/s některých kalibračních vzorků.



Obrázek 17 | Mössbauerovo spektrum kalibračního vzorku α -Fe.

4.2.1. Elektronická řešení spektrometrů

Důležitou elektronickou částí spektrometru je řídicí systém, počítač nebo modul, který zajišťuje celkové řízení experimentu, synchronizaci vzájemného pohybu zářiče a vzorku s detekcí fotonů záření γ a ukládání měřeného spektra. Při použití řídicího modulu pak tento umožňuje propojení spektrometru s počítačem a vzájemný přenos dat.

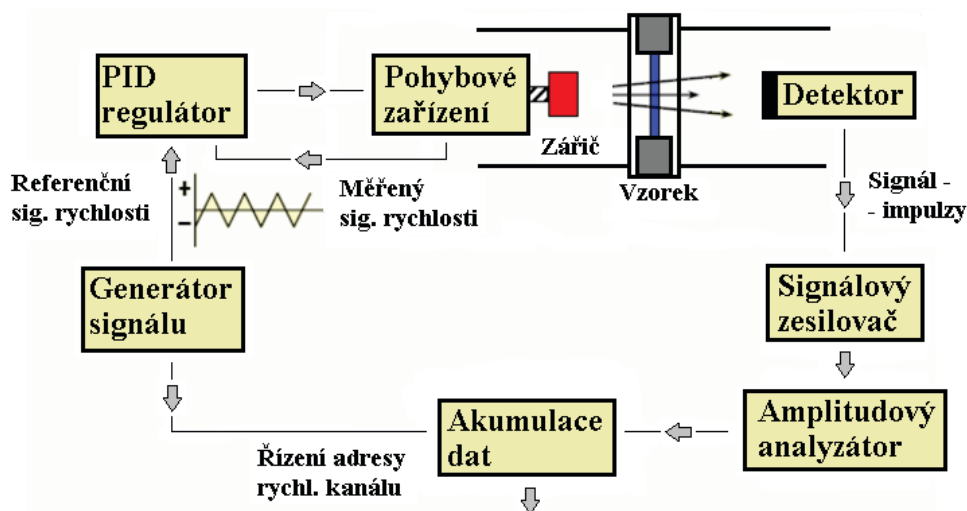
Kvalita spektrometru je dána především přesností rychlostní osy spektra, ta souvisí s kvalitou pohybového zařízení a obvodem řízení pohybu. Statistická kvalita spektra, doba jeho registrace atd. souvisí s použitým detektorem a s přesností digitalizace a analýzy signálu z detektoru. Synchronizace těchto dvou procesů (registrace, pohyb) v řídicí aplikaci je pak zásadní pro správnou akumulaci spektra.

Pohybové zařízení je nejdůležitější součástí Mössbauerova spektrometru, protože realizace přesně kontrolovaného průběhu rychlosti pohybu zářiče nebo vzorku určuje kvalitu celého spektrometru. Požadovaný interval rychlosti je dán potřebnou šířkou měřeného spektra (podle studovaného prvku) a může dosahovat hodnot až $\pm 1\,000$ mm/s.

Po prvním období mechanických pohybových systémů byly dalším typem **elektrodynamická** pohybová zařízení. Nejpoužívanější mód měření s těmito zařízeními je mód konstantního zrychlení. Takovéto zařízení má dvě cívky pohybující se v poli permanentních magnetů, kde se **primární cívka** používá k pohybu zářiče nebo vzorku a **sekundární cívka** ke sledování jeho *okamžité* rychlosti. Správný průběh budicího proudu je zajištěn částečně dopřednou kompenzací přenosové funkce zařízení a částečně připojením zpětné vazby pomocí druhé cívky a elektroniky. Elektrodynamická pohybová zařízení s rychlostní zpětnou vazbou se v Mössbauerově spektroskopii používají nejčastěji.

4.2.2. Konfigurace spektrometru

Struktura standardního Mössbauerova spektrometru je zobrazena na obrázku 18. Proces akumulace spekter kombinuje údaje o okamžité rychlosti pohybu radioaktivního zdroje s odpovídající intenzitou záření γ prošlého vzorkem.



Obrázek 18 | Blokový diagram standardního Mössbauerova spektrometru.

Pro vývoj řídicího systému Mössbauerových spektrometrů se používají různé programovací techniky a přístrojová řešení. Tradiční řešení jsou založena primárně na samostatných přístrojích nebo specifických (v jaderné fyzice) modulárních systémech NIM, CAMAC. Dnes už lze většinu těchto prvků nahradit DSP zařízením či algoritmem a programové prostředí LabVIEW umožňuje realizaci takovýchto systémů s minimálním požadavkem na jednoúčelovou elektroniku.

Spektrometr musí provádět úkoly jako jsou pulzně-výšková analýza záření γ , generování referenčního signálu rychlosti pro pohyb zdroje, PID (proporcionálně integračně derivační) regulaci relativní rychlosti pohybu mezi zářičem a vzorkem a akumulaci Mössbauerova spektra.

Na obrázku 18 je zářič upevněn na pohybovém zařízení (lineárním motoru) nejčastěji realizovaném ve formě elektrodynamického zařízení s dvěma cívkami. Záření emitované ze zářiče prochází vzorkem, část dopadajícího záření se absorbuje a neabsorbované záření je detekováno detektorem. Pro lepší zpracování digitální elektronikou může být signál z detektoru následně elektronicky upraven (zesílen, tvarován). Takovýto signál je pak amplitudově analyzován, jsou vybrány jen některé impulzy v signálu z detektoru, které odpovídají detekci fotonů s požadovanou energií a jsou ukládány do výsledného histogramu. Souběžně s tímto procesem je generátorem generován signál rychlosti. Tento signál je veden jako referenční signál do PID regulátoru a je porovnáván se

signálem rychlosti z pohybového zařízení (přesněji z jeho měřicí cívky) reprezentující okamžitou rychlost připevněného zářiče. PID regulátor se zpětnou vazbou vyhodnocuje tento měřený signál porovnáním s referenčním a vypočítává tzv. signál chyby jejich rozdílem. Zároveň PID regulátor generuje na svém výstupu zadávací signál (řídící) takového tvaru a úrovně, aby signál chyby byl co nejmenší a tím i pohyb zářiče co nejpřesnější.

5. Realizace virtuálního Mössbauerova spektrometru

V této části jsou představeny metody zpracování impulzů, řízení pohybového zařízení a DSP synchronizace při vývoji systému Mössbauerova spektrometru. Všechny úlohy využívají funkce prostředí LabVIEW, kdy původní jednoúčelové části spektrometru byly nahrazeny DAQ moduly. Hardwarové řešení je založeno na DAQ zařízeních pracujících na platformách USB, PCI nebo PXI, řízených hlavní aplikací běžící na osobním počítači nebo PXI kontroléru [2,3,8]. Konečná aplikace provádí akumulaci Mössbauerových spekter, detailní analýzu zpracovávaného signálu z detektoru v energetické a časové doméně a také separátní ladění systému řízení rychlosti pohybového zařízení [11]. Tento koncept lze použít s běžnými spektroskopickými lavicemi [10,12–14], radioaktivními zdroji a detektory záření γ [3,7,9].

Mössbauerův spektrometr jako virtuální měřicí přístroj [2,3] se skládá ze spektrometrické lavice (zářič, kolimátory, pohybové zařízení, držák vzorku, detektor záření γ), měřicího hardware (osobní počítač, vysokorychlostní digitizér a funkční generátor) a řídicí aplikace.

Využitím LabVIEW a zařízení NI PXI, PCI, USB a CompactRIO (pro realizaci PID regulátoru [11]), je vytvořený Mössbauerův spektrometr koncepčně otevřený a flexibilní pro práci v různém hardwarovém uspořádání [3]. Například jde o spektrometr CEMS řízený aplikací virtuálního přístroje v systému PXI [3,10], který demonstruje flexibilitu vyvinutého systému.

Systém detekce záření γ a jeho analýzy je založen na mnohakanálové analýze s využitím rychlého digitálního osciloskopu, který je řízen synchronizačním signálem z funkčního generátoru. Funkční generátor pracuje v přístrojové hierarchii jako tzv. master a kromě signálu rychlosti pro řízení pohybu zářiče generuje také zmíněný synchronizační signál pro digitální osciloskop o stejné frekvenci (desítky Hz). Tento signál je směrován do digitálního osciloskopu pomocí vnitřní sběrnice RTSI [2,8]. Principy těchto procesů byly popsány v předchozích částech práce.

Touto technikou byl vytvořen Mössbauerův spektrometr s módem proměnné rychlosti a časovou metodou registrace spekter.

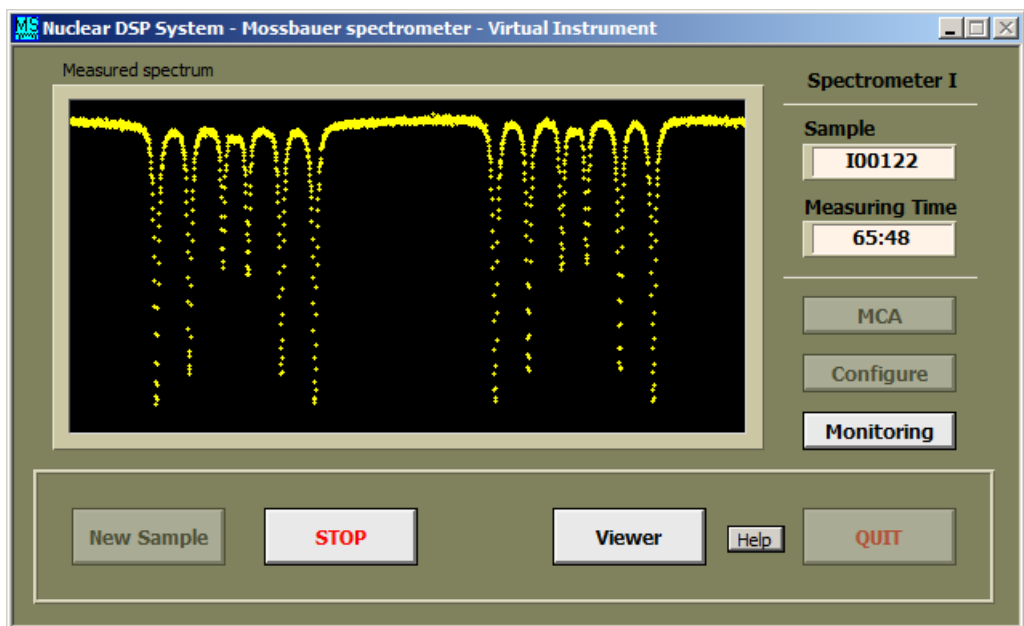
5.1. Amplitudový analyzátor a akumulace spekter

Vzorkovací rychlost výstupního signálu z detektoru závisí na typu detektoru (scintilační, plynový, polovodičový), doby scintilace, trvání výboje, a tedy délce impulzů. Funkce správné detekce byly testovány použitím digitizérů PXI, PCI a USB, jmenovitě NI PXI-5102 (8bitový, 20 MS/s), NI PCI-5124 (12bitový, 200 MS/s) a NI USB-5133 (8bitový, 100 MS/s) [2,3,7,8].

Proces akumulace dat v sobě kombinuje informaci o rychlosti pohybu zářiče s registrovanou intenzitou záření γ . Vzorkem jsou absorbovány pouze některé fotony jím procházející, což je dáno jejich energií. Zadetekované, prošlé a rezonančně vyzářené fotony a jim odpovídající impulzy z detektoru jsou zaznamenány. Amplitudový diskriminátor je založen na LabVIEW WPkD funkci. Další softwarové části provádějí mnohakanálovou analýzu signálu z detektoru.

Kód základního konceptu blokového diagramu spektrometru synchronizuje DAQ procesy pro generování signálu rychlosti a zpracování signálu z detektoru. Další podprogramy pro práci s daty, konfiguraci měření atd. jsou zahrnuty v aplikaci. Čelní panel hlavní aplikace je znázorněn na obrázku 19 [3,8].

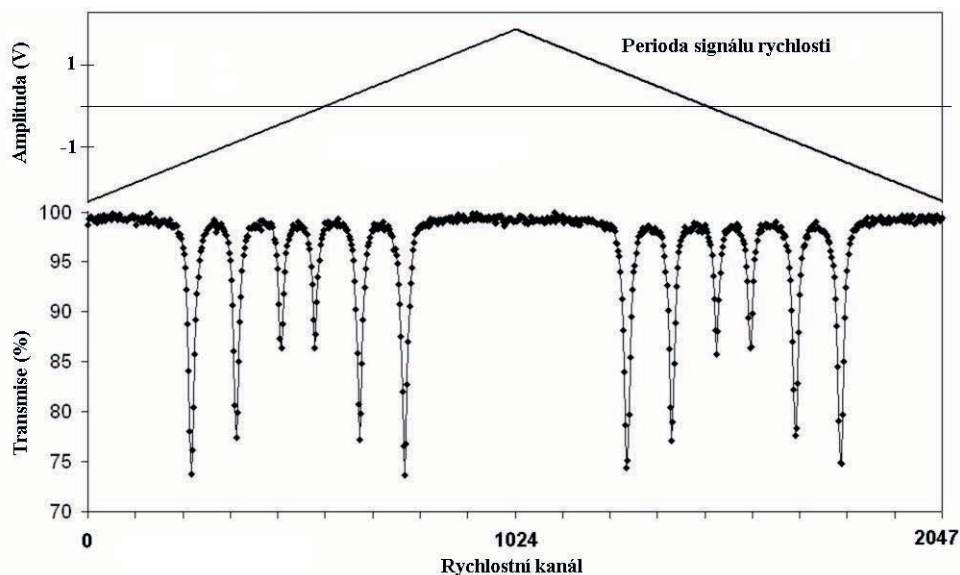
Jak bylo řečeno, signál z detektoru je vzorkován vhodnou vzorkovací rychlostí, jejíž hodnota závisí na délce impulzů, aktivitě zářiče atd. Obecně ale postačuje vzorkování 10 MS/s pro běžné konfigurace. Jelikož jde o časový mód Mössbauerova spektrometru, určuje vzorkovací rychlost signálu z detektoru společně s frekvencí referenčního signálu z detektoru celkový počet bodů na jednu periodu pohybu zářiče (vzorku), a tedy počet kanálů prvotního Mössbauerova spektra. Tento blok dat je následně zpracován algoritmem pro zpracování impulzů, určení amplitudy a diskriminaci. Uvedený algoritmus musí probíhat co nejrychleji, aby byl blok dat (perioda) zpracován do doby obdržení dat z následující periody. Tak například je-li frekvence referenčního signálu rychlosti 30 Hz a vzorkovací rychlost signálu z detektoru 10 MS/s, jedna perioda pohybu zářiče bude trvat cca 33 ms a blok dat bude obsahovat 333 333 vzorků. Vzorky jsou reprezentovány nulou



Obrázek 19 | Čelní panel hlavní aplikace virtuálního Mössbauerova spektrometru.

nebo jedničkou podle výsledku diskriminace impulsu – je-li amplituda impulsu v diskriminačním okně, příslušný bod má hodnotu 1, jinak 0.

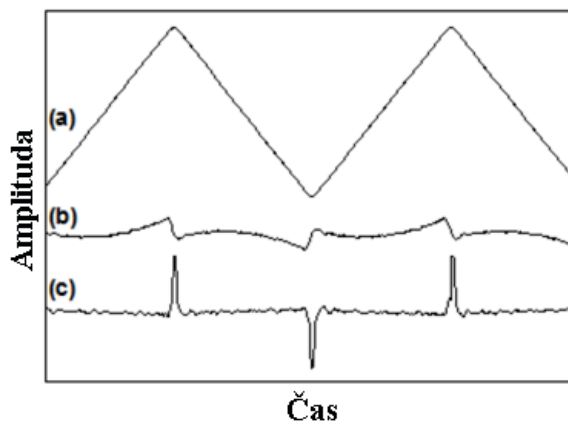
Každá perioda pohybu zářiče je následně rozdělena na 2 048 rychlostních/časových intervalů, sečtením vhodného počtu sousedních bodů. Počet detekovaných fotonů nashromážděných během tohoto každého časového intervalu je uložen do příslušného rychlostního intervalu (kanálu) spektra. Proces akumulace spektra se provádí periodickým sčítáním těchto dat za každou periodu po dobu několika hodin až dnů. Výsledek akumulace dat pro periodický pohyb (trojúhelníkový signál rychlosti) je znázorněn na obrázku 20, kde je demonstrováno měření referenčního vzorku α -Fe používaného pro kalibraci rychlostní osy spektra. V tomto módu je vždy obdrženo totožné spektrum pro náběžnou i sestupnou hranu signálu rychlosti. Tato spektra jsou vůči sobě zrcadlově převrácena a lze je sčítat, čímž se docílí také zdojnásobení statistiky (četnosti) finálního spektra.



Obrázek 20 | Princip akumulace Mössbauerova spektra vzhledem k periodě signálu rychlosti.

5.2. Systém řízení rychlosti

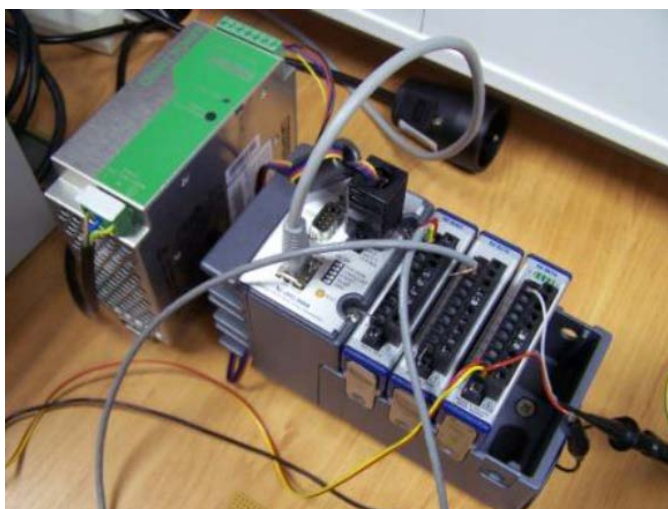
Běžný systém řízení rychlosti pro Mössbauerův spektrometr se skládá z generátoru signálu rychlosti, PID regulátoru a elektrodynamického pohybového zařízení (lineárního motoru), ke kterému je připevněn zářič. Referenční signál rychlosti je veden přes PID regulátor do řídicí cívky motoru a signál z měřicí cívky se vede zpět do PID regulátoru. Typický referenční signál rychlosti a) , řídicí signál b) a signál chyby c) jsou znázorněny na obrázku 21. Signál rychlosti má frekvenci obvykle desítky Hz, a tedy i další přidružené signály. Tato frekvence je dána především vlastnostmi pohybového zařízení a PID regulátoru.



Obrázek 21 | Signál rychlosti a), řídicí signál b), a signál chyby c).

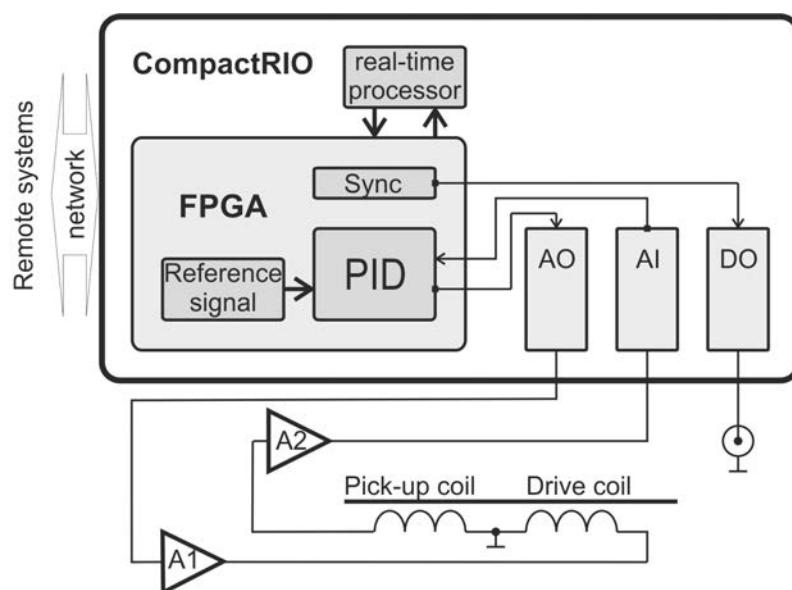
Zařízení analogových výstupů, použité jako generátory signálu rychlosti, jsou propojená s PID regulátorem. S využitím flexibility konceptu virtuální instrumentace může být karta/modul generátoru nahrazena například multifunkční kartou s vhodným analogovým výstupem na platformách USB, PCI i PXI [3]. Limitujícími (minimálními) parametry analogového výstupu jsou rozlišení 12 bitů a obnovovací (vzorkovací) rychlost 150 kS/s. Vybraná (a otestovaná) zařízení jsou například NI PCI-5401 a NI PXI-5401 (12bit, 40 MS/s) funkční generátory a dále NI PCI-6040E (12bit, 1 MS/s), NI USB-6221 (16bit, 833 kS/s) a NI USB-6215 (16bit, 250 kS/s) multifunkční DAQ karty. Jednou z výhod použití PXI a PCI modulů digitizérů a funkčních generátorů je, že obsahují dříve zmíněnou RTSI sběrnici, která umožňuje jednoduše synchronizovat akumulaci spekter s pohybem zářiče.

Jako generátor signálu rychlosti byl také úspěšně testován systém NI CompactRIO, který byl vybrán pro realizaci digitálního PID regulátoru pracujícího v jednom zařízení [11]. Kontrolér pracuje v reálném čase a šasi (obrázek 22) obsahující programovatelné pole FPGA, provádí PID algoritmus, který je založen na diskretní PID funkci v modulu (SW balíček) LabVIEW FPGA Module.



Obrázek 22 | Systém NI CompactRIO použitý jako digitální PID kontrolér.

Modul analogového vstupu zpracovává signál z měřicí cívky lineárního motoru a referenční signál rychlosti, používá-li se externí zdroj tohoto signálu. Modul analogového výstupu pak generuje řídicí signál a modul digitálního výstupu generuje spouštěcí signál pro synchronizaci akumulace spektra. Blokový diagram vyvinutého systému je uveden na obrázku 23 [11]. Vyvinutý systém byl testován na běžném pohybovém zařízení, ale i na novém typu elektrodynamického pohybového zařízení pro tzv. rezonanční spektrometr [13, 14].



Obrázek 23 Blokový diagram vyvinutého systému PID regulátoru s generátorem signálu rychlosti. Bloky AI, AO a DO představují moduly pro analogové výstupy, analogové vstupy a digitální výstup (synchronizace), převzato z [11].

Verze tohoto digitálního PID regulátoru bez generátoru signálu rychlosti (byl použit externí zdroj signálu rychlosti ze systému Mössbauerova spektrometru) byla použita při analýze vlivu externího pole kryogenního systému se supravodivým magnetem na kvalitu regulace pohybu [12]. Zde byl potvrzen vysoký výkon digitálního PID regulátoru v systému CompactRIO, kdy tento systém dostatečně kompenzoval vlivy externího magnetického pole na magnetický systém pohybového zařízení.

Podobně byla také testována kvalita Mössbauerových spekter při různých frekvencích zadávacího signálu rychlosti (pohybu lineárního motoru) při hledání optimální frekvence pohybu zářiče v dané spektrometrické sestavě [15]. Analýzy potvrdily získání spekter s nejvyšší kvalitou při frekvencích pohybu (signálu rychlosti) nižších, než je vlastní rezonanční frekvence pohybového zařízení (například 44 Hz).

5.3. Spektroskopický systém s nulovou mrtvou dobou

Účinnost moderních měřicích systémů (nejen spektroskopických) je určena kvalitou hardware použitého ke zpracování signálů a software použitého k analýze dat. Požadavkem na dnešní systémy je, aby zpracovávaly data také s nulovou ztrátou dat.

Použití speciálních synchronizačních technik a pokročilých přístrojových ovladačů pro měřicí hardware umožňuje vylepšovat provádění měřicích procesů a tím například zmenšit mrtvou dobu měření (měřicího přístroje). V práci [4] je prezentován postup snižování mrtvé doby měření u Mössbauerova spektrometru vyvinutého pomocí LabVIEW použitím tzv. low-level programování rychlých digitizérů a dalších programovacích technik, které zrychlují zpracování dat. Mezi pokročilé techniky zde patří aplikace sofistikované metody spouštění měřicího zařízení a zpracování dat, ale také metody ukládání a vyčítání dat z karty osciloskopu, implementace FIFO (First In First Out) techniky při manipulaci s daty v paměti a optimalizace kódu po spouštěcím signálu.

Podrobnou analýzou byl optimalizován kód pro vyčítání/zachytávání dat z paměti karty pro co nejrychlejší průběh. Byl tak vytvořen systém, který vyčte veškerá data (s nulovou mrtvou dobou) a zároveň běží prakticky do nekonečna. Tento způsob vyčítání dat je komplexní a aplikace má vysokou propustnost dat. Aplikace čte dostupný záznam (signálu z detektoru) a uloží jej v paměti

karty digitálního osciloskopu ještě před jeho posláním do počítače. V rámci dalšího vylepšování byl do kódu implementován FIFO princip manipulace s daty. Takto se dosáhlo nejrychlejšího způsobu zpracování dat díky jejich umísťování do tzv. fronty v jedné smyčce kódu (ozn. jako DAQ) a jejich vyčítání z fronty v druhé programové smyčce (ozn. jako DSP).

Obě smyčky pracují v paralelním módu. DSP smyčka s algoritmy pro zpracování impulzů čeká na data z DAQ smyčky s přístrojovými ovladači NI-SCOPE. V DAQ smyčce se data (jednotlivé periody záznamů signálu z detektoru) zapisují do FIFO paměti/fronty. Je-li provádění DSP smyčky dočasně pomalé, nestíhají se zpracovávat v reálném čase všechny periody a paměť se zaplňuje. Po uvolnění procesů v procesoru počítače se data z FIFO paměti mohou zpracovat navíc souběžně s příchozími záznamy. Je-li DSP smyčka pomalá trvale, paměť FIFO přeteče, data se ztratí trvale a systému tak narůstá mrtvá doba. To je dáno aktuální konfigurací použitého hlavního počítače.

Nicméně v této konfiguraci SW/HW bylo dosaženo pouze nenulové mrtvé doby přístroje, a to cca 20 %, a tedy stále dochází ke ztrátě naměřených dat.

Po analýze času příchodu impulzu spouštěcího signálu a doby jeho trvání byla upravena délka záznamu signálu z detektoru (počet vzorků). Mírné snížení počtu vzorků (nepoužívaná část) bylo provedeno s ohledem na zamezení ztráty užitečného signálu a tedy špatné analýzy vzorku. S touto novou verzí jsou registrovány všechny nastalé synchronizační spouštěcí signály a nedochází ke ztrátě dat, tím bylo dosaženo **nulové mrtvé doby** v procesu zpracování dat. Samozřejmě ve spektroskopickém systému je více jiných zdrojů mrtvé doby (zejména v detekční části).

Uváděná nulová mrtvá doba byla dosažena u karet použitých digitizérů verze PCI. V případě USB karet byla vždy dosažena nejméně 50% mrtvá doba z důvodu nemožnosti aplikovat tzv. low-level programovací techniky s NI-SCOPE ovladači pro tuto platformu.

6. Inovace výuky oborů Aplikovaná fyzika a Přístrojová fyzika

Výuka předmětu Číslicové měřicí systémy KEF/ČMS 1–4

Problematika číslicových měřicích systémů prezentovaná v první části práce je podrobně probírána v samostatném předmětu (4 semestry) vedeném na Katedře experimentální fyziky (Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci). V základním kurzu studenti získají znalosti o vývoji, složení a principu ČMS, zejména počítačem řízených, na různých platformách. Během praktické části výuky pak absolvují kurzy základů programování v LabVIEW [16]. V navazujících semestrech ČMS 2–4 studenti vyvíjí pokročilé programy nejen v LabVIEW s využitím měřicího hardware různých výrobců [17].

Výuka předmětu Virtuální instrumentace v experimentech jaderné fyziky KEF/VIJF

Z důvodu rozšíření výuky a zájmu studentů byl na Katedře experimentální fyziky vytvořen předmět „Virtuální instrumentace v experimentech jaderné fyziky“. Předmět navazuje na předměty Číslicové měřicí systémy 1–4 a Praktika z atomové a jaderné fyziky, kde se studenti seznamují se základními a pokročilými technikami tvorby měřicích a testovacích systémů a základy charakterizace ionizujícího záření [17].

7. Závěr

Vzdělávání v oblasti vývoje číslicových měřicích systémů je dnes standardní náplní technických oborů. Automatizované měřicí a testovací systémy používané v laboratořích i průmyslu musí splňovat vysoké požadavky, které lze technikou virtuální instrumentace docílit. Vysoký výkon, funkčnost, rychlost, přesnost, flexibilita, ale i krátká doba vývoje, nízké náklady, nenáročná obsluha, to jsou vlastnosti, které by moderní systémy měly splňovat.

Využití virtuální instrumentace v jaderné fyzice umožňuje velice rychle vytvořit funkční systém řízení specifických zařízení a zpracování dat s jejich okamžitou analýzou. Vývoj komplexního měřicího zařízení v sobě zahrnuje snímání signálů, získávání dat a jejich ukládání, generování signálů a přesnou synchronizaci těchto a dalších úkonů. Systémová otevřenost virtuálních měřicích přístrojů byla úspěšně demonstrována na vývoji Mössbauerova spektrometru.

Využitím virtuální instrumentace byl vyvinut unikátní systém Mössbauerova spektrometru. Detailní analýzou s optimalizací programu a vylepšením správy dat bylo dosaženo nulové mrtvé doby měření. Systém lze jednoduše doplňovat o další algoritmy, podprogramy, ale i technická rozšíření. Flexibilita systému je dána možnou jednoduchou výměnou částí spektrometrické lavice (detektor, pohybové zařízení apod.), ale i začleněním vysokoteplotní pícky nebo kryostatu.

Kromě komerčních zařízení systém používá také laboratorně vyráběné detektory, signálový zesilovač a pohybové zařízení. Více jak 10 let je koncept virtuální instrumentace využíván v laboratorních Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého v Olomouci při vývoji nejen Mössbauerových spektrometrů.

V současné době se zde používá deset Mössbauerových spektrometrů a z toho je osm postavených na koncepci virtuální instrumentace. Jeden spektrometr využívá USB moduly (multifunkční karta a vysokorychlostní digitizér), dalších pět PCI karty (funkční generátor nebo multifunkční karta a vysokorychlostní digitizér) a sedmý využívá PXI moduly (funkční generátor a vysokorychlostní digitizér). Osmý Mössbauerův spektrometr je postavený na bázi stolních přístrojů řízených z počítače. Spektrometry se používají pro běžná transmisní měření při pokojové teplotě, při realizaci CEMS, pro nízkoteplotní analýzy ve vnějším magnetickém poli, ale i pro testování nových metod. Na této koncepci (PCI) se také v současné době vyvíjí speciální typ Mössbauerova spektrometru, tzv. TDMS (Time Differential Mössbauer Spectrometer) – spektrometr s časovým rozlišením. Ten detekuje a analyzuje jak registraci 14,41 keV tak i 122,06 keV fotonů záření γ v koincidenčním uspořádání simultánně ze dvou detektorů.

Nový digitální PID regulátor postavený na systému CompactRIO se používá právě v nejdůležitější (a nejnáročnější) aplikaci spektrometru při měření za nízkých teplot a ve vnějším magnetickém poli. Zde systém musí zachovávat vysokou stabilitu a spolehlivost v nestandardních pracovních podmínkách, jako jsou vibrace od laboratorních přístrojů (kryostaty, vakuové vývěvy apod.) a magnetické pole (od magnetického systému se supravodivým magnetem). Podobné řešení PID regulátoru v systému sbRIO se opět používá pro testování nových metod.

Systém se neustále vyvíjí použitím nového měřicího hardware i software. Jelikož je vše koncipováno ve formě podprogramů v nadřazených aplikacích, je snadné vyměnit různé algoritmy za výkonnější a optimalizované. Takto byl např. aplikován zmiňovaný paralelismus s FIFO technikou, ale byl vyvinut i nový rychlý algoritmus pro analýzu impulzů se zaměřením na jejich amplitudu a TOF hodnotu [5]. Tento algoritmus je mnohem rychlejší v porovnání s používanou WPkD funkcí a navíc poskytuje přesnější hodnoty amplitud a TOF nalezených impulzů. Jeho využitím ve virtuálních Mössbauerových spektrometrech bylo dosaženo zvýšení statistické kvality spekter. Navíc tento algoritmus méně zatěžuje procesor počítače.

Souběžně s vývojem a vylepšováním Mössbauerových spektrometrů jako přístrojů, probíhají i práce na vylepšování zpracování naměřených dat (spekter), opět s využitím LabVIEW. Některá naměřená spektra bývají dosti zašuměná a po několikadenním měření a jen obtížně lze z nich vyčíst relevantní informace. Z tohoto důvodu byl vyvinut algoritmus filtrace šumu z naměřeného spektra před jeho zpracováním fitačním programem [18]. Program využívá tzv. periodogram k určení hladiny šumu, který lze odstranit ze spektra, čímž dojde ke zvýšení poměru signál/šum. Filtrovaná spektra se pak lépe zpracovávají. Dalším efektem je snížení nutné doby akumulace spektra pro získání požadované kvality a tím i snížení provozních nákladů.

Uvedený podsystém mnohakanálového analyzátoru je také v současné době modifikován a rozšiřován pro detailnější analýzu mnohakanálových spekter z různých detektorů ionizujícího záření. Jde zejména o fitování fotopíků ve spektrech, výpočet detekční účinnosti, pološírek fotopíků apod., a to zejména pro metrologické účely při porovnávání různých detektorů. Další podobnou studií je například porovnání analogových a digitálních technik [19].

Jak bylo dříve zmíněno, je rozpracována studie simulace mnohakanálové analýzy s možností „naprogramovat“ si tvar teoretického spektra, zpracovávat/tvarovat generované impulzy navrženými algoritmy a sledovat jejich vliv na výsledný tvar spektra.

Realizace Mössbauerova spektrometru jako virtuálního měřicího přístroje představuje výraznou změnu ve vývoji řídicího systému, který je flexibilní pro využití s různými spektrometrickými lavicemi. Jednotlivé části této lavice – zejména detektory a pohybová zařízení – prochází také vývojem. Například do detektorů je integrována elektronika, vyvíjí se nové způsoby konstrukce (CEMS), zlepšují se parametry detektorů, či vznikají nové typy pohybových zařízení. Tento vývoj je dokladován vznikem národních patentů nebo užitečných vzorů [20–23], jejichž vlastníkem je Univerzita Palackého v Olomouci.

Veškeré vylepšování Mössbauerova spektrometru se provádí z důvodu zvyšování kvality získaných spekter, umožnění detailnější analýzy zkoumaných vzorků, a to zejména složitých z hlediska jejich struktury. Zrychlení provádění analýz umožňuje studovat vzorky, které by například i během několikadenního měření mohli degradovat. Snižují se požadavky na stabilitu „celého“ systému i vzorku. Snižují se také provozní náklady zejména při používání kryokapalin u nízkoteplotních měření. Ale také se během doporučené doby používání zářiče, jehož aktivita neustále klesá, proměří více vzorků.

Seznam použitých zdrojů

- [1] J. Pechousek, R. Prochazka, V. Prochazka, J. Frydrych: Virtual instrumentation technique used in the nuclear digital signal processing system design: Energy and time measurement test. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 637 (2011), 200–205.
- [2] J. Pechousek, M. Mashlan: Mössbauer spectrometer in the PXI/CompactPCI modular system. *Czechoslovak Journal of Physics* 55 (2005), 853–863.
- [3] J. Pechousek, R. Prochazka, D. Jancik, M. Mashlan, J. Frydrych: Universal LabVIEW-powered Mössbauer spectrometer based on the USB, PCI or PXI devices. *Journal of Physics: Conference Series* 217 (2010), 012006.
- [4] J. Pechousek, P. Novak, J. Navarik, P. Kohout, L. Machala: Mössbauer spectroscopy system with increased performance and flexibility – utilization in material research. *Journal of Electrical Engineering* 64, 6 (2013), 386–389.
- [5] P. Novak, J. Navarik, J. Pechousek, V. Prochazka, L. Machala, J. Tucek: Development of fast pulse processing algorithm for nuclear detectors and its utilization in LabVIEW-based Mössbauer spectrometer. *Journal of Instrumentation* 9 (2014), T01001.
- [6] J. Pechousek: Application of Virtual Instrumentation in Nuclear Physics Experiments, In: Practical Applications and Solutions Using LabVIEW™ Software. (2011) S. Folea (Ed.), Intech. <http://www.intechopen.com/articles/show/title/application-of-virtual-instrumentation-in-nuclear-physics-experiments>
- [7] J. Pechousek, M. Mashlan, J. Frydrych, D. Jancik, R. Prochazka: Improving detector signal processing with pulse height analysis in Mössbauer spectrometers. *Hyperfine Interactions* 107 (2007), 1–8.
- [8] J. Pechoušek: Mössbauerův spektrometr jako virtuální měřicí přístroj v systému CompactPCI/PXI. (2006) Dizertační práce, Olomouc.
- [9] J. Pechoušek, D. Jančík, J. Frydrych, J. Navařík, P. Novák: Setup of Mössbauer Spectrometers at RCPTM. *AIP Conference proceedings* 1489 (2012), 186–193.
- [10] J. Frydrych, M. Mashlan, R. Zboril, J. Pechousek, M. Hermanek: CEMS and CXMS Spectrometer: Construction and Applications. *Acta Metallurgica Slovaca* 13 (2007) 298–301.
- [11] J. Pechousek, R. Prochazka, M. Mashlan, D. Jancik, J. Frydrych: Digital proportional-integral-derivative controller of a Mössbauer spectrometer. *Measurement Science and Technology* 20 (2009), 017001, 4pp.
- [12] J. Pechousek, D. Jancik, V. Evdokimov, R. Prochazka: Velocity driving system for an in-field Mössbauer spectrometer. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 267 (2009), 846–848.
- [13] M. Mashlan, V. Yevdokymov, J. Pechousek, R. Zboril, A. Kholmetskii: Mössbauer spectrometer with novel moving system and resonant detection of gamma rays. *Hyperfine Interactions* 156/157 (2004), 15–19.
- [14] M. Mashlan, A. Kholmetskii, V. Yevdokimov, J. Pechousek, O. Verich, R. Zboril, R. Tsonchev: Mössbauer spectrometer with resonant detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 243 (2005), 241–246.
- [15] J. Pechousek, R. Prochazka, J. Cuda, J. Frydrych, D. Jancik: Investigation of the Mössbauer spectrum quality as a dependence on the frequency of the velocity signal. *AIP Conference proceedings* 1258 (2010), 134–142.
- [16] J. Pechoušek: Základy programování v prostředí LabVIEW. (2004) Vydavatelství UP v Olomouci, Olomouc.
- [17] J. Pechousek, P. Novak, J. Navarik, F. Latal, M. Vujtek: Education of computer-based measurement systems and their application in nuclear physics experiments by the use of virtual instrumentation technique. Článek v recenzním řízení, *Measurement*.

- [18] R. Prochazka, P. Tucek, J. Tucek, J. Marek, M. Mashlan, J. Pechousek: Statistical analysis and digital processing of the Mössbauer spectra. *Measurement Science and Technology* (2010), 025107, 7pp.
- [19] E.E. Ermis, G. Tektas, E. Pilicer, C. Celiktas, J. Pechousek: Analogue and digital analysis of the effects of some parameters in determination of the best experimental energy resolution. *Turkish Journal of Physics* 38 (2014) 203–213.
- [20] R. Procházka, M. Mašláň, J. Tuček, P. Tuček, J. Pechoušek: Mössbauerův spektrometr. Patent č. 302779/B6, Úřad průmyslového vlastnictví (2010) Praha.
- [21] M. Mašláň, J. Pechoušek, V. Yevdokimov: Pohybové zařízení pro Mössbauerův spektrometr s rezonanční detekcí záření gama. Patent č. 302515/B6, Úřad průmyslového vlastnictví (2011) Praha.
- [22] J. Frydrych, J. Pechoušek, P. Novák, L. Machala, P. Schovánek, M. Pech, M. Hrabovský, M. Palatka, J. Navařík, L. Nožka: Detekční blok Mössbauerova spektrometru. Užité vzor č. 2546/U1, Úřad průmyslového vlastnictví (2013) Praha.
- [23] J. Navařík, P. Novák, J. Pechoušek, D. Jančík, L. Machala, M. Mašláň: Systém pro detekci ionizujícího záření. Užité vzor č. 25901/U1, Úřad průmyslového vlastnictví (2013) Praha.