



微计算机 (APPLE II) 绘制 质谱棒图的程序

徐 梦 山

(中国科学院化学所)

〔摘要〕 本文介绍适用于微计算机 (APPLE II) 与 WX-4675 型绘图仪联用, 绘制质谱棒图的程序。

随着质谱研究工作的发展和一些新的离子化技术的采用 (例如快原子轰击源), MS-50 质谱计原有的计算机数据系统已不能适应新的要求, 为此我们采用微计算机 (APPLE II) 与 WX-4675 型六笔绘图仪联用, 改进了质谱棒图绘制方法, 得到满意结果, 此绘图系统对于没有计算机数据系统的质谱计也具有普遍应用价值。

绘图系统程序采用 BASIC 语言, 程序框图见图 1。

一、系统功能与特点

(1) 系统工作进程全部采用人机对话方式, 便于非计算机专业人员使用。用户通过键盘输入谱图数据 (质量数、绝对或相对强度), 系统自动进行归一化处理。全部数据输完之后, 可在屏幕上显示所有数据, 供用户检查。如有错误, 可立即修改。

(2) 绘图系统具有将数据长期保存的功能。用户可以通过人机对话方式, 向系统发出指令, 便可将谱图名称, 质量范围、以及质量数、强度等数据存入软磁盘中, 长期保存, 并可随时调用。

(3) 系统在绘制质谱棒图的同时, 还可以通过打印机将数据以表格形式打印出来。它包括化合物名称、质谱峰序号、质量数, 绝对和相对强度等。接口系北京八里庄医疗器械厂生产的“SW-APPLE 并行打印/绘图接口转换器”。打印机和绘图仪共享一个并行输出口。

(4) 系统具有将局部质量范围内的峰强度放大的功能。质谱图高质量区的信息对化合物结构有重要意义。但往往峰强度较小, 显示不明显。系统允许用户通过键盘输入所选取的放大部分及放大倍数之后, 在正常谱图上方同时绘出放大部分的谱图, 以提高谱图质量 (见图 4)。

(5) 系统允许用户根据需要选择谱图的质量范围、单框或双框, 并可在一次输入谱图数据后多次重复绘制谱图。

二、绘制谱图实例

- (1) 图 2 系某一化合物质谱棒图的一部分, 质量范围由 100 至 300, 谱图为单框。
 (2) 图 3 是绘制的一张完整的质谱图。质量范围由 0 至 600, 双框。
 (3) 图 4 是一张假想的质谱棒图。画此图的目的是说明本绘图系统可画任意范围的谱图, 并在某一质量范围内能将峰强度加以放大。
 (4) 表 1 是图 4 表格输出形式。

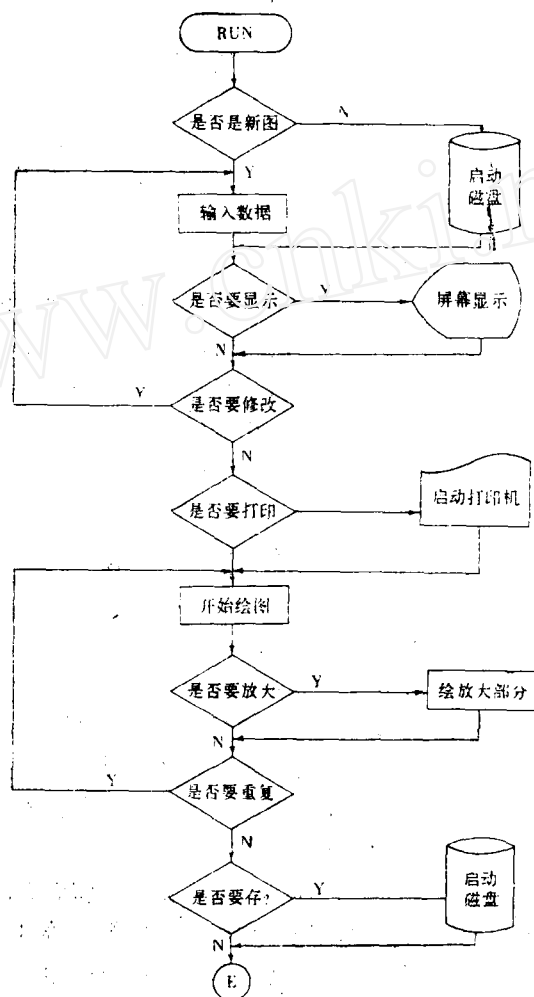


图 1 程序框图

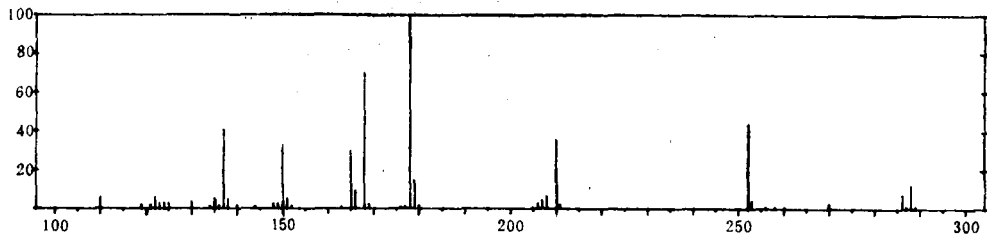


图2 本系统绘制的某化合物质谱图

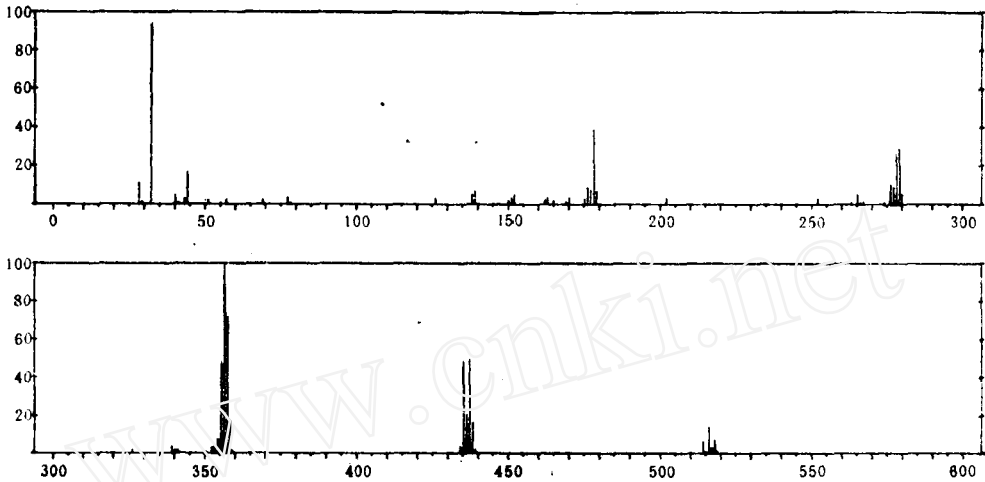


图8 本底系统绘制的某化合物质谱图

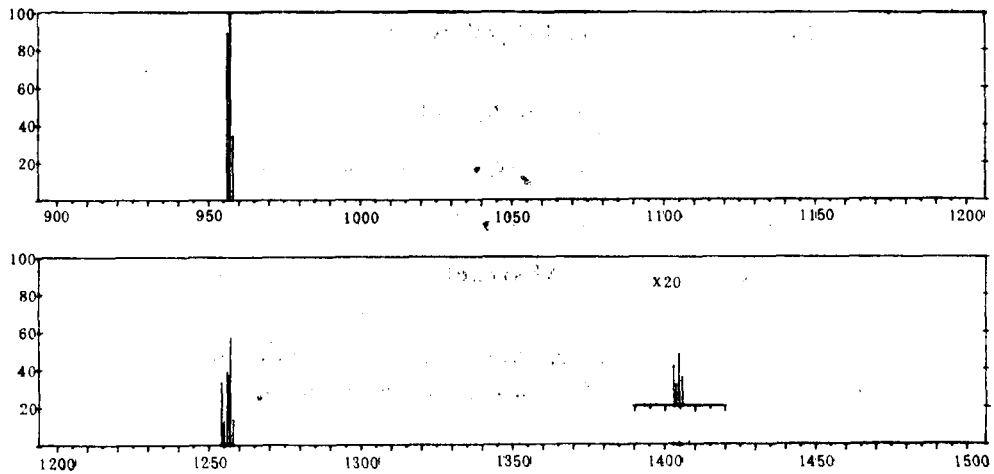


图4 一张假想的质谱图 (1390至1420加以放大)

表1 与图4相对应以表格形式给出数据

INSTITUTE OF CHEMISTRY
SPECTROMETRY LABORATORY

TITLE OF RUN: OP HNDB-JKL. 008

No	MASS	REL. ABUNDANCE	ABS. INT.
1	1403	1.2	1.1
2	1404	.6	.6
3	1405	1.4	1.4
4	1406	.8	.8
5	1254	33	33
6	1255	11	11
7	1256	39	39
8	1257	56	56
9	1258	14	14
10	956	89	89
11	957	100	100
12	958	34	34
END OF DATA			

本工作得到梁曦云同志指导，特此感谢。

The Program for Plotting a Graphic Mass Spectrum on Microprocessor APPLE II

Xu Mengshan

(Institute of Chemistry, Academia Sinica)

Received 25, July 1984

Abstract

The program for plotting a graphic mass spectrum on microprocessor APPLE II combined with WX-4675 has been introduced.