

CMS型四极质谱数据系统

史小军 毛福明

(南京工学院电子工程系)

〔摘要〕微处理机与四极质谱计联用有很多优点。本文叙述了该数据系统的硬件、软件 and 主要性能，并给出了部分实验结果。

一、概 述

CMS—200型四极质谱数据系统由TP—801单板机、12位A/D和D/A转换板、内存扩充板和微型打印机组成。

四极质谱计利用高频双曲电场分离不同质荷比的离子，从而测定物质的组份及其含量，在各个领域有广泛的运用。据报道，目前国内外生产的各类质谱计中，四极质谱计约占90%。但是，在未配备计算机的质谱计中，存在一些难以解决的问题。例如，数据处理花时费力，分段扫描难以实现，记录仪绘制谱图速度太慢，没有数据存贮能力，无法进行多个谱峰的连续监测等。以上这些问题，采用计算机后都可迎刃而解。

我们研制的CMS—200型四极质谱数据系统（已于85年2月通过了省级鉴定），具有下述特点：采用廉价的单板机实现了一般采用微机系统所具有的主要功能，重新定义了键盘，使参数输入和使用操作十分方便；能在全量程内精确标定谱峰的质荷比，能连续存贮多幅谱图，信息量可以满足实用要求；具有较强的数据处理能力，能以数表、谱图、棒图、曲线、数值等多种形式打印输出质谱信息；能够进行分段扫描和连续监控，特别是该系统具有很强的通用性，原则上可与各种类型的四极质谱计联用。

二、系 统 硬 件

图1是CMS—200型四极质谱数据系统的方框图。

TP—801单板机是系统的核心。所有的外部设备都在它指挥下工作，所有的功能都是通过它实现的。考虑到质谱信息量很大，而单板机只有4KRAM，远不够应用。若以质量范围为200计算，单位质量采样20个点，经12位A/D转换后分两个字节存贮，则一幅完整的谱

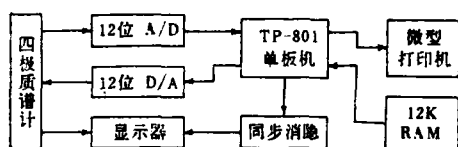


图1 质谱数据系统方框图

1986年7月25日收

图需要8K内存才够存放。因此,我们设计了一块RAM扩充板,容量为12K,使系统的随机存取容量达到16K,基本满足了存贮多幅谱图的要求。

打印机型号为TP-801P。它是质谱信息输出的主要设备,可用来打印质谱数据,如质荷比、离子流、百分比等,还可打出曲线、棒图、谱图。另外,还利用打印机实现人机对话、打出日期、总压强、各工作参数。使仪器的操作更为容易,输出的信息更加清晰。

模数转换器(A/D)用来将质谱信号转变为相应的数字信号,供计算机进一步处理。数模转换器(D/A)主要用来产生阶梯锯齿波,控制四极质谱计的高频电压,实现质量扫描。还可用D/A将计算机存贮的数字信息转变为相应的模拟量,供显示器或谱图记录仪使用。

同步消隐电路采用一个D触发器,在计算机程序控制下,实时发出消隐脉冲,消除光点回扫期间显示器屏幕上的回扫线和杂散信号,同时也能防止光点长时间停留在某一点上而损坏荧光屏。

由于单板机的几何尺寸和平面布置都不太适合仪器配套的要求,因此,我们对TP-801单板机作了一些必要的改造。主要是将原来和单板机连成一体按键、显示器和打印机移至前面板上,用扁平电缆将它们与单板机相连。使操作比较方便,整机也较紧凑美观。

三、系统软件

硬件是基础,而软件才真正决定了这个系统的功能。本系统的软件由两大部分组成。第一部分是管理程序,它使用户能够方便地操作该系统,第二部分是应用程序,它使系统能够完成各种预定的功能。所有的程序都用汇编语言写成,约6K字节,固化在三片EPROM中。

1. 管理程序

管理程序是在TP-801单板机的原有监控程序的基础上,作了一些相应的修改和补充形成的。它保留了原监控程序中键盘扫描和LED显示程序,改写了初始化和非屏蔽中断服务程序,重新定义了数字键和命令键并修改了相应的入口地址,增加了十进制转化为二进制程序和工作参数设定程序等。

在管理程序中作了如下安排:

将单板机上原来的十六进制数字键定义为十进制数字键,使更符合人们的习惯,避免了不必要的复杂的十进制—十六进制的转换。

为了使工作参数的输入方便灵活,安排了两种参数输入方式。一种采用人机对话方式,它只用一个参数键和相应的数字键就可以按照打印机打出的提示询问信息,连续输入各个工作参数。这种方式适用于开机后设定参数。另一种方式是安排了几个参数键,每一个键都对应某一种工作参数,它们与数字键配合,可以方便地修改任意一个工作参数,并打印出提示助记信息。这种方式适用于仪器在工作过程中改变某些工作参数。

该系统的所有功能都通过命令键实现。用户不用记住各应用程序的入口地址,只要按下相应的命令键即可。

为使用户方便地中断程序运行,设置了一个中断键,只要按下此键,程序立即停止运行,便于调整工作参数或执行其它功能。

为便于调整仪器,还安排了一个扫描键。在扫描工作状态下,谱峰显示在荧光屏上但并

不采样, 操作者可以通过屏幕观察峰形、峰高、分辨等现象, 将仪器调节到最佳工作状态。

作了以上安排后, 仪器的操作十分方便, 易于掌握。

2. 应用程序

应用程序是为了完成特定功能而编写的。主要有扫描控制、数据采集、数据处理、峰位确定、峰强计算、为一化处理、百分比计算、基线校准、本底扣除、定时监测和信息输出等。

(1) 扫描控制程序

该程序用来产生锯齿波扫描电压, 可以扫描全谱, 也可以分段扫描。各段的起始质量和终止质量可以由操作者任意设定。扫描速度也可根据需要改变, 从1ms到10s共分为10档。

(2) 数据采集程序

该程序用来采集质谱信息。离子流经法拉第筒或倍增器接收后放大, 通过A/D转化为相应的数字信号并输入到计算机内存, 供进一步处理分析之用。实际上, 数据采集程序是和锯齿波产生程序有机地结合在一起的。

(3) 数据处理程序

该程序对质谱数据进行各种处理, 包括峰位确定、峰强计算、百分比计算、累加平均和ASC II码转换等。并将处理过的数据按一定的格式排列起来, 供打印输出之用。

(4) 基线校准程序

在采集数据时, 有时不能保证无信号时电流一定为零。因此, 操作者可以自行设定所要扣除的基线值。在基线校准程序的作用下, 所采集的数据可以自动校准, 避免由此引起的误差。

(5) 本底扣除

该程序可以将采集的多幅图中的任意一幅图指定为本底, 实现两幅图的相减。在研究材料的吸放气或者扣除残气本底对分析结果的影响方面, 实用价值是比较大的。同时, 也可提高工作效率和实验精度。

(6) 扫描非线性校正

该程序用来产生一个扫描电压的预失真, 使之恰好补偿高频整流电子管在低端的非线性带来的峰位偏移, 保证质量定标的精度。

(7) 信息输出程序

该程序包括打印数值、谱图、棒图、曲线和数值等, 由于微型打印机的限制, 在打印上述信息之前, 必须对数据进行预处理。打印数表时, 必须将待打印的内容转化为ASC II码, 并按一定的格式排列好。打印棒图、谱图或曲线时, 必须将最大值按144归一化。因为TP-801P微型打印机横向只能打印144个点。

应用程序中还包括一些通用子程序。如寻找最大值、累加、乘法、除法、码制转换等。

四、实验结果

我们将CMS-200型质谱数据系统与SZ-001四极质谱计联机后, 对其真空系统的残气作了分析, 下面给出的是部分实验结果。

表 1 是质谱信息中离子流分量的数表形式。共有四项, 第一项为质荷比 (m/e), 第二项为离子流强度 ($I(mv)$), 第三项为归一化值 $I/I_m\%$, 第四项为百分比 $I/\Sigma I\%$ 。数表上方是工作参数, 选定的工作参数为: 通道数为4, 各通道的质重范围分别为: 第一通道是 1—2, 第二通道是13—18, 第三通道是27—32, 第四通道是39—44。扫描速度为30ms/amu, 间隔为10, 扣基线5mv, 采集 1 幅图。

表 1 质谱信息的数表形式

DATE:			
CHAN—NUMBER = ?			
4			
CHAN—MASS = ?			
1	001—002		
2	013—018		
3	027—032		
4	039—044		
SCAN(ms/amu) = ?			
30			
INTERVAL = ?			
10			
BASE(mv) = ?			
5			
SPECTRUM = ?			
1			
m/e	I(mv)	I/I _m %	I/Σ I %
2	155	14.08	9.80
14	55	5.01	3.49
16	32	2.90	2.02
17	50	4.55	3.16
18	50	4.55	3.16
28	1100	100.00	69.53
32	115	10.46	7.26
40	20	1.82	1.26
44	5	0.45	0.32

图 2 是与数表对应的谱图。单位谱峰采样20个点, 谱图就是由这二十个点的信息组成的。

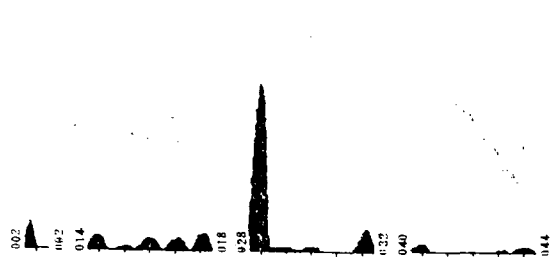


图 2 计算机给出的系统残气质谱图

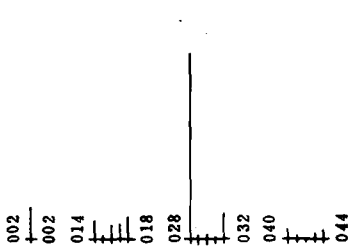


图 3 棒状质谱图

从谱图中可以形象直观地看出峰形好坏、分辨高低、峰宽等情况, 这些信息对仪器的调试是很有价值的。

图3是与数表和谱图对应的棒状图。棒高代表峰强, 它的优点是清晰直观, 是一种很好的数据输出方式。

从上面计算机给出的信息可以发现, m/e 为32的峰存在, 约占残气总量的7%, 说明该真空系统存在漏气现象。这里所做的实验主要是为了说明CMS-200型质谱数据系统与质谱计联机后是如何工作的。数据系统还有另一些功能, 如监测多个谱峰、吸放气情况下的本底扣除、绘制离子流时间曲线等。

五、结 束 语

CMS-200型质谱数据系统是我们仪器微机化方面作的初步探索, 今后要做的工作还很多。例如结合定量分析, 建立标准谱图库; 用微机对四极质谱计作全面的控制, 包括最佳工作参数的自动选择、离子源电压的自动调节等。

参加本工作的还有朱为、丁宇宁、汪敏、沈翔、于炳琪、何晓红、范卫政和朱勤等同志, 在此表示感谢。

参 考 文 献

1. S. Burzynski, *Vacuum*, Vol 32, No 3, 163 (1982)
2. J. R. Chapman, "Computers in Mass Spectrometry", Academic Press, 1978, P18

Quadrupole Mass Spectrum Data System Type CMS-200

Shi Xiaojun & Mao Fuming

(Electronic Engineering Department,
Nanjing Institute of Technology)

Received 25, July 1986

Abstract

Micro processor connected with a quadrupole mass spectrometer has many advantages. In this article, the hardware, the software and the characteristics of this data system are stated. The results of the experiment are given.