

# 一种质谱数据的选取方法

朱 为

(东南大学电子工程系 南京 210096)

〔摘要〕本文介绍一种在 GS-250 型气体、固体质谱计中使用的质谱数据选取软件,为完成样品的分析任务提供了便利和实用的手段。

关键词:质谱计 质谱数据 计算机软件

## 1 前言

在一些质谱分析工作中,如气体快速反应、气体放电的击破取样、不确切预知的材料分析等,待分析样品成份、含量或样品出现时刻等难以十分肯定。为不丢失信号,质谱计的计算机控制系统中所设定的质量扫描通道(起始质量数至终止质量数间隔)一般要设定得较宽,重复采样的谱图数要尽可能多一些。实验结束后,操作者再把采集到的谱图数据重新复现、分析和理解,把有用的谱峰信息进行认定、处理及输出(打印或存盘),完成样品的分析。原始记录的实验数据还要继续保存,以供研究者再次理解、分析和处理。

为满足上述要求,我们在 GS-250 型气体、固体质谱计中,设计了一套实用的谱图数据选取软件,使用十分方便<sup>[1]</sup>。

该软件包括:质量通道设定(8 路);通道离子流放大倍率设定( $\times 1$ ,  $\times 10$ ,  $\times 100$  或  $\times 1$ ,  $\times 10$ ,  $\times 30$ ,  $\times 100$ ,  $\times 300$ ,  $\times 1000$ );在采集到的多幅质谱图上,对某一幅质谱图中待分析的质量数进行选定及分析;采用自动或人工基线(本底)扣除;选定质谱峰(最多 8 个质量数)的离子流强度与时间曲线显示或输出(用 DXY-1100 彩色绘图仪绘制);模拟质谱峰、棒图和数据表格打印;两幅质谱图相减显示或相减模拟质谱图绘制等。

## 2 软件的物理模型

### 2.1 关于基线的扣除

图 1 绘制了不同倍率的 3 个质量扫描通道的质谱图例子。通道 1 的质量范围为  $M_1 \sim M_2$ , 倍率  $G=10$ ; 通道 2 为  $M_3 \sim M_4$ ,  $G=100$ ; 通道 3 为  $M_5 \sim M_6$ ,  $G=1$ 。质量扫描速度和质谱图采样图幅数以及质谱计的工作条件均可任意设定,并在图的右上角用窗口显示或关闭,扫描的图幅序号也实时标注。质谱图上基线的扣除可自动进行,但在一些研究性分析中用手动扣除为佳,特别是痕量杂质分析时更为突出。造成基线漂移的原因除离子流检测电路零位偏移外,更主要的是质谱管本身的散杂离子流引起的本底。该本底又依赖于分

1996 年 6 月 11 日收

析样品的压强、电子倍增器的增益等因素,有时难以预知。痕量要求越高,倍率也要取得越高,基线偏离就越严重。如图 1 的通道 2 所示<sup>[2]</sup>。

在质谱计实际操作时,宁可把基线调离零线位置,防止造成离子流采样的 A/D 转换器反向输入,而把小信号削除。这种现象很容易发生,且在质谱图上不易发觉。

## 2.2 质量标尺线

在质谱图上设置了质量标尺线。质量标尺线可左右慢速或快速移动。在标尺线下自动显示当前位置质谱峰的质量数和所选用的放大倍率值。当标尺线定位在需要选择的质量数峰顶时,按回车键确认,则该峰的质量数、峰顶离子流值及放大倍率即存储起来,供后续进一步数据处理。

## 2.3 基线标尺线

与质量标尺线一样,当移动标尺线至无峰处,即基线上时,按回车键确认,存储基线值。不同倍率,均需标定基线;同一倍率,只需标定一次。

## 2.4 选定质谱峰的离子流与时间的 I-t 分布曲线及分析

质量标尺线所选定的质谱峰离子流可自动绘制成按时间分布的曲线,如图 2 所示。时

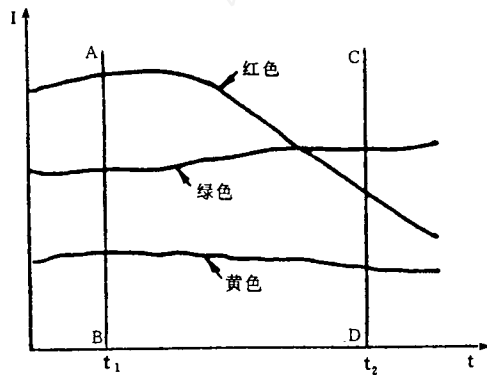


图 2 选定质谱峰的 I-t 曲线

(红色  $M=18$   $G=1$  绿色  $M=28$   $G=10$  黄色  $M=32$   $G=100$ )

(Fig. 2 I-t curve of selected mass)

## 2.5 两幅质谱图的相减显示

所有的模拟质量质谱图均可在屏上显示,对任意两幅感兴趣的质谱图,可以进行相减运算,如图 3 所示。谱图中的离子流座标可以用线性,也可以用 5 个量级的对数表示;可以归一化,也可以是实际离子流值。在用多通道扫描时,每个通道的起始质量数和终止质量数均在质量座标线下标注,屏幕上采用彩色图形显示,输出时用彩色绘图仪绘制,以示区

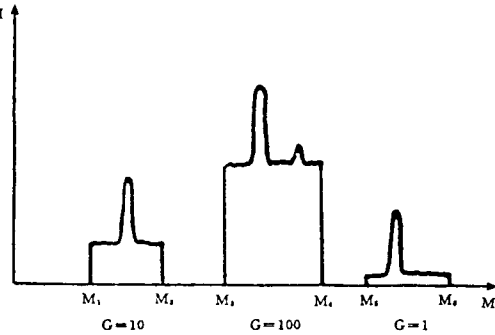


图 1 3 个不同倍率的质量通道质谱图

(Fig. 1 Mass spectrum with three mass channels at different gains)

别。

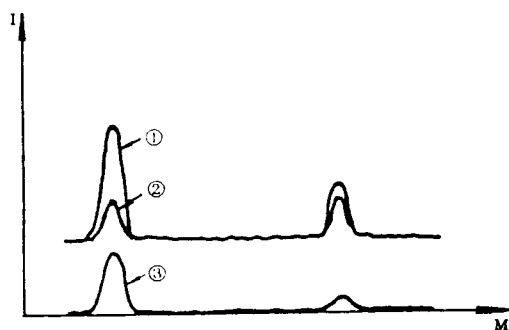


图3 两幅质谱峰相减图

(Fig. 3 Subtracted spectrum between two spectra)

①第m幅质谱图(红色) ②第n幅质谱图(绿色)

③m-n质谱图(白色)

## 2.6 棒图、表格显示或打印

整幅质谱图、选定某几个质量数的质谱图或两幅质谱图相减,均能以棒图或数据表格的形式显示和打印出来。两幅质谱图相减,即是通常的本底气氛扣除法。

## 2.7 选定质量数的窗口显示

在一幅质谱图上,如果需要对所关心的质量数进行评估,则可用质量标尺线对所需的质量数进行质量标定、基线标定,然后按功能键显示出离子流的比值,如图4所示。当所选的质量数超过14个时,则以流动方式显示。

致谢:本工作得毛福明教授的指导,在此致谢。

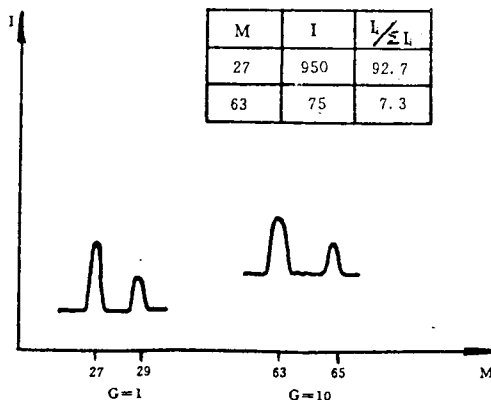


图4 谱图上选定质谱峰的窗口显示

(Fig. 4 Display of selected mass on a spectrum)

## 参 考 文 献

- 1 毛福明. 质谱学报, 1995, 16(1): 24
- 2 史小军, 毛福明. 质谱学报, 1987, 8(2): 28

# A Method for Selecting Mass Spectrum Data

Zhu Wei

(Department of Electronic Engineering, Southeast University, Nanjing 200096, China)

Received 1996-06-11

## Abstract

A mass spectrum data select software that is used in GS-250 gas/solid mass spectrometer is introduced. It will give a convenient and practical method for sample analysis.

**Key Words:** mass spectrometer, mass spectrum data, software