中華農業研究（Jour. Agric. Res. China）33(2)：206～221（1984）

利用家用電腦控制儀器分析之軟體設計[1]

I. 紫外——可見光掃描式分光光度計

劉慧瑛　李蘭帝[2]

摘要：本軟體係使用與蘋果二號可共容之培塞語言設計，目的在於連接分光光度計與廉價的家用電腦，以處理紫外——可見光光譜資料。其用途包括：一、樣本標示與光譜資料之輸入，轉存及拷貝；二、讀取及記錄吸光密度值；三、簡易地校正波長，並增加波長測定之準確性；四、將分光光譜及一次微分譜由螢幕示出，或經多元化處理（改變波長範圍、放大比例、刻度比例、方向及繪筆顏色選擇等）後由印出器印出；五、尋找最大吸收波長並記錄其吸光密度值等。

近年來資訊工業蓬勃興起，個人用微電腦發展急遽，目前已達到價廉而普遍的地步。由於所謂的「家用電腦（Personal Computer）」已具備小型電腦功能，可以控制儀器設備或分析、處理資料文件，所以作者擬藉軟體（Software）設計，連接家用電腦及實驗室常用之分析儀器，以達到分析、處理、儲存資料或控制之目的，使分析工作能進入電腦化操作。

國內大多數化學及生化學工作者受到專業化知識的限制，多未能自行設計軟體以合己需，在使分析儀器進入電腦化操作之過程中，均須仰賴國外廠商所製造之電腦化新型儀器。使用此種電腦化分析設備，雖能省却自行設計軟體之難處，然而不乏下述缺點：1）舊有儀器不堪使用，即或能用，亦需購買廠商指定之電腦裝置。2）價格高昂。3）電腦處理系統發生故障時，唯賴原廠修護。4）軟體受到原廠設計限制，難做改進。5）部分電腦系統沒有儲存資料裝置或軟體設計。6）電腦裝置與儀器密接，無法做其它用途等。

紫外——可見光分光光度計（UV-Vis Spectrophotometer）爲化學及生化試驗分析上常用的儀器之一。經掃描記錄後之吸光光譜則被用爲鑑定物質種類及測定濃度之依據。目前所使用之一般掃描式光度計及記錄器，除非測定之樣本可以長久保存不變質，必要時得再做測定外，所得到之光譜資料僅存於一記錄紙上，對特定波長之吸光密度值均需經由手控、目視之現場記錄，或在紙上測量計算才能求得，既耗時又影響準確度。

本軟體設計之目的在於改進上述之缺點，而以當前國內最通行之培基（BASIC）語言爲程式語言，俾能使一般的紫外——可見光光度計儀器操作人士能够利用國產家用電腦裝置，簡易地加以安裝操作，使分析工作迅速進入電腦化，而不需要仰賴進口現成儀器或技術。文後附錄程式之目的在於使操作者能容易地了解程式內容，於必要時可加以修改後應用於現成的儀器設備，分析樣本或分析方法上。有關此軟體之功能則於結果與討論中敍述之。

材料與方法

一、使用材料：

1.臺灣省農業試驗所　研究報告第 1162 號。
2.本所農業化學系助理研究員、本所儀器化驗室主任。臺灣省　臺中縣　霧峰鄉。

（一）紫外——可見光掃描式分光光度計（HITACHI Model 124 Double Beam Spectrophotometer）。

（二）國產家用電腦（Personal Computer）：INTEK 牌，48 KRAM 附數字鍵及具大小寫功能。（與 APPLE II PLUS 共容）

（三）類比數字轉換裝置（Analog/Digital Convert Apparatus）：利用家用電腦主機（CPU）內之類比數字轉換裝置，即 GAME I/O 之搖桿位置 PDL 0—3 處。

（四）螢幕監視器（TV Monitor）：12吋任一廠牌均可。

（五）繪圖印出器（Printer/plotter）：RADIO-SHACK 牌， Model TRS-80, CGP-115.

（六）磁碟機（Disk Drive）：適合5¼吋 Floppy disk 之任一廠牌均可。

（七）錄放音機（Cassette Recorder）：任一廠牌均可，與磁碟機擇一而用。

（八）校正用濾光玻璃（Didymium Calibrating Filter）

二、儀器連接：

圖一、所示爲分光光度計與家用電腦，螢幕監視器、印出器、磁碟機及錄放音機之連結情形，其詳細說明如下：

（一）將分光光度計之記錄輸出線，經過類比數字轉換裝置而與電腦主機（CPU）相連。本文中所使用之轉換裝置由一記錄器，可變電阻與 CPU 內之類比轉換器（即 GAME I/O 之 PDL (2)）構成。

由於該轉換必須以電阻信號輸入，而儀器輸出原爲電壓信號，因此先將該信號接於記錄器（Recorder），再將記錄器之筆連接於 120K 歐姆（Ohm）之可變電阻；該電阻信號即可輸入 CPU 內 GAME I/O 中 PDL 0至3之任一位置，而達到類比數字轉換之目的。

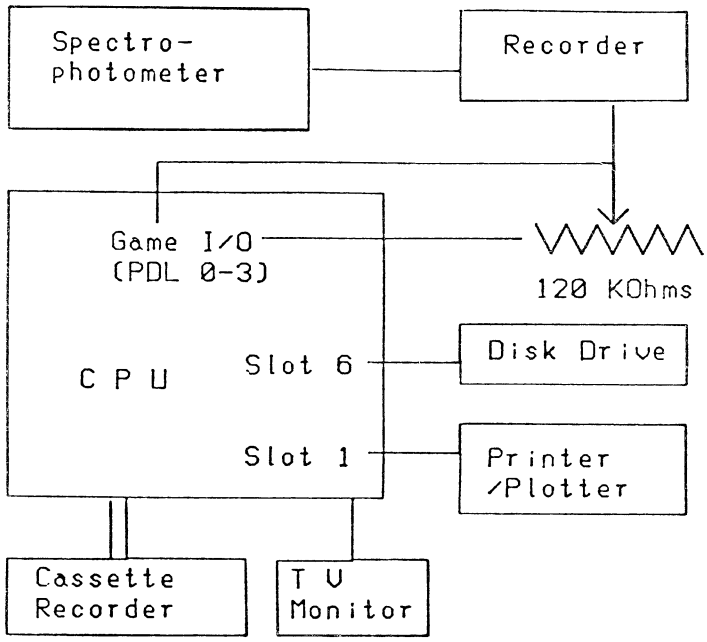


Table 1. Schematic diagram showing connection between computer and spectrophotometer

圖一：家用電腦與分光光度計連接圖

另有一種可連接達到轉換目的之電壓類比數字轉換器（A/D Converter），使用此種轉換器時

，軟體設計除了在讀取光譜資料部分（程式1之行號220及程式2之行號290）須參考其使用說明而略加修改外，其餘程式則可共用。

該轉換器在轉換數字時所耗用之時間隨轉換數字大小而異，此結果使得波長測定值因讀取數值時之累積時間差異而有誤差產生。在軟體設計裡爲求避免該影響，因此在程式2之行號290中，以 Q 值作爲校正時間差異之補償因子 ， Q 值亦隨轉換數字大小而異。經此校正程式處理後 ， 波長誤差爲 ±0.2nm。

（二）錄放音機之輸出入線與 CPU 之卡氏錄音機連接座相連。

（三）螢幕監視器與 CPU 之 TV 監視器連接座相連。

（四）繪圖印出器與週邊卡 (Printer Interface Card) 相接後，將後者插入 CPU 之1號插座 (Slot 1). 。

（五）磁碟機與週邊卡 (Disk controller Card) 連接後，將後者插入 CPU 之6號插座。

三、使用程式：

（一）吸光密度值校正曲線程式（程式1）

（二）分光光度計光譜處理及儲存程式（程式2）

程式1

```
5  HOME : DIM X% (1600) : DIM X(20)
10 VTAB (3) : PRINT SPC (3) ; "CALIBRATE MUST START FROM O. D. =0" : L=
   75 : P=1
15 HOME : VTAB (5)
20 PRINT "PRESS ANY NUMBER KEY LARGER" : PRINT : PRINT "THAN 2 TO
   STOP"
25 INPUT "O. D.=" ; X(P) : IF X(P)>2 THEN 45
30 PRINT "PRESS ANY KEY TO START" : GET P$
35 FOR Y=0 TO 49 : GOSUB 220 : Q(P)=Q(P)+X %) : NEXT Y : Q(P)=Q(P)/50 :
   GOSUB 200
40 P=P+1 : FOR K=1 TO 10 : PRINT CHR$ (7); : NEXT K : GOTO 15
45 O=Q(1) : FOR I=2 TO P-1 : Q(I) =Q(I)-O
50 X=X+X(I) : Q=Q+Q(I) : Z=Z+Q(I)/X(I) : V=V+X(I)*X(I) : NEXT I
55 X=X/(P-2) : Q=Q/(P-2) : Z=Z/(P-2) : V=V/(P-2)
60 B=(Q-X*Z)/(V-X*X) : A=Z-B*X : PRINT "A=" ; A : PRINT "B=" ; B
65 FX=270/X(P-1) : FQ=150/Q(P-1)
70 HGR2 : HCOLOR=3
75 HPLOT 5, 5 TO 5,155 TO 275,155
80 FOR Y=5 TO 155 STEP 15 : HPLOT 5, Y TO 9, Y : NEXT
85 FOR X=5 TO 275 STEP 27 : HPLOT X, 155 TO X, 151 : NEXT
90 FOR I=2 TO P-1 : X=X(I)* FX+5 : Q=155-Q(I)* FQ
95 HPLOT X-2, Q TO X+2, Q : HPLOT X, Q-2 TO X, Q+2 : NEXT
100 FOR X=5 TO 275 STEP 5
105 X1=(X-5)/FX : Q=(A* X1+B* X1* X1)* FQ : Q=155-Q : IF O>Q THEN Q=0
106 HPLOT X, Q : NEXT
110 GET P$ : TEXT : GOSUB 225 : HOME
115 PRINT"PLOT CALIBRATION CURVE OR NOT (Y/N) ?" : INPUT P$ : IF P$ =
```

```
"N" THEN PRINT CHR$(4); "RUN SPECT"
120 DX=360/INT ( X(P-1)+0.1) : DQ=300/(INT (Q(P-1)/1000+1)*1000)
124 PR# 1 : PRINT CHR$ (18) : PRINT "M0, -360" : PRINT "I"
125 PRINT "M70, 0" : PRINT "Xo, 60, 5" : PRINT "H" : PRINT "M70, 0" : PRINT"
    X1, 72, 5" : PRINT "H"
130 FOR I=0 TO 5 : I$ =STR$ (I* (300/DQ/5)) : B$ ="          " : I$ =LEFT$ (
    B$, 5-LEN (I$))+I$
135 PRINT "M0,"; I* 60-10 : PRINT "P"; I$ : NEXT I
140 FOR J=0 TO 5 : FJ=J* INT (360/DX/5* 100)/100 : IF FJ=0 THEN J$ ="0" : G
    OTO 180
145 IF 1>FJ THEN J$ ="0"+STR$ (FJ) : GOTO 180
150 IF FJ-INT (FJ)=0 THEN (FJ)=0 THEN J$ =STR$ (FJ)+"0" : GOTO 18 0
155 J$ =STR$ (FJ)
180 PRINT " M"; 55+J* 72; ", -20" : PRINT "P"; J$ : NEXT J
185 FOR I=2 TO P-1 : X=X(I)* DX-2 : Q=Q(I)* DQ-2 : PRINT"M"; X+70; ","
    Q : PRINT "J2, 2, 2, -4, -4, 0" : NEXT I : PRINT "H"
186 PRINT "M70, 0"
190 FOR X=70 TO 430 : X1=(X-70)/DX : Q=(A* X1+B* X1* X1)* DQ : PRINT"D";
    X; ","; Q : NEXT X
195 PRINT "M200, -49" : PRINT "POptical Density" : PRINT "M50, -70" : P RINT
    „PFig. Calibration curve"
196 PRINT "A" : PR# 0 : HOME : VTAB (5) : PRINT "CALIBRATION IS OVER" :
    GET P$ : GOTO 115
200 PR# 1 : S$ =STR$ (X(P)) : IF> X(P) AND X(P)>0 THEN S$ ="0" +S$
205 Q(P)=INT (Q(P)* 10)/10 : Q$ = STR$ (Q(P))
210 IF Q(P)-INT (Q(P))=0 THEN Q$ =STR$ (Q(P)) +"0"
215 PRINT "O. D.=" ; S$ ; SPC (9- LEN (S$)) ; "X% (" ; P ; ")=" ; SPC (8-LEN
    (Q$)) ; PR# 0 : RETURN
220 S%=0 : FOR I=1 TO 50 : S%=S %+PDL (2) : NEXT : X%(Y)=S% : PRINT S% :
    FOR J=1 TO L : NEXT J : RETURN
225 PR# 1 : PRINT "A=" ; (INT (A * 100))/100 ; SPC (6) ; "B=" ; (INT (B* 100))/
    100 :
230 PRINT "X%(I)-X%(I)-X%(1)=A*O. D. (I)+B*O. D. (I)*" : PR# 0 : RETURN
```

程式2

```
2   DIM X% (2200) : DIM W(30) : DIM P% (5) : DIM W$(1) : HOME
4   RS =4.4
6   D=4 : G=50 : M=10/D/G
8   HOME : VTAB (3) : PRINT SPC(3) ; "1" ; SPC(3) ; "CALIBRATE"
10  VTAB (6) : PRINT SPC (8) ; "TAKE DATA FROM"
12  VTAB (8) : PRINT SPC(3) ; "2" ; SPC(3) ; "SPECTROPHOTOMETER"
14  VTAB (10) : PRINT SPC(3) ; "3" ; SPC(3) ; "DISK"
16  VTAB (12) : PRINT SPC(3) ; "3" ; SPC (3) ; "TAPE"
```

```
20 VTAB (20) : PRINT SPC(10); : INPUT"SELECT NO. : " ; P$
22 IF P$ ="1" THEN HOME : VTAB (9) : PRINT CHR$(4) ; "RUN CALIBRATION"
24 IF P$ ="2" THEN GOSUB 272 : GOSUB 292 : GOTO 274
26 IF P$ ="3" THEN GOSUB 335 : GOTO 36
28 IF P$ ="4" THEN GOSUB 310 : GOTO 63
30 GOTO 8
36 HOME : VTAB (5) : INPUT "PRINT OR NOT (Y/N) ?" ; P$ : IF P$ ="Y" THEN
   PR# 1 : GOSUB 284 : PRINT : PR# 0 : GOTO 42
38 IF P$ ="N" THEN GOSUB 284 : GET P$ : GOTO 42
40 GOTO 36
42 HOME : VTAB (3) : PRINT SPC(3) ; "1" ; SPC(3) ; "CONTINUE"
44 VTAB (5) : PRINT SPC(3) ; "2" ; SPC(3) ; "REFRESH"
46 VTAB (8) : PRINT SPC(8) ; "STORE DATA IN"
48 VTAB (11) : PRINT SPC(3) ; "3" ; SPC(6) ; DISK"
50 VTAB (13) : PRINT SPC(3) ; "4" ; SPC(6) ; "TAPE"
52 VTAB (18) : PRINT SPC(5); : INPUT "SELECT NO. : " ; P$
54 IF P$ ="1" THEN 64
56 IF P$ ="2" THE N 8
58 IF P$ ="3" THEN GOSUB348 : GOTO 42
60 IF P$ ="4" THEN GOSUB 296 : GOTO 42
62 GOTO 42
64 HOME : VATB (10) : PRINT SPC(3) ; "PLOT WAVE RANGE (NM) ?"
66 VATB (14) : PRINT SPC(8); : IN PUT "FROM : " ; SI : VATB (16) : PRINT SPC
   (8); : INPUT "TO : " ; TI
68 NS=INT ((S-SI)* N/(S-T)+0.5) : NT=INT ((S-TI)* N/(S-T)+0.5)
70 E=INT ((NT-NS)/279)
72 HO ME : VATB (3) : PRINT SPC(3) ; "1" ; SPC(3) ; "EXIT" : VATB (1) : PRINT
   SPC(3) ; "O" ; SPC(3) ; "SEARCH MAX. WAVELENGTH"
74 VATB (5) : PRINT SPC(3) ; "2" ; SPC(3) ; "REFRESH"
76 VTAB (B) : PRIN T SPC(3) ; "3" ; SPC(3) ; "GRAPH" ; SPC(7) ; "IN MONITOR"
78 VTAB (10) : PRINT SPC(3) ; "4" ; SPC(3) ; "DIFF. GR"
80 VTAB (12) : PRINT SPC(3) ; "5" ; SPC(3) ; "O. D. VALUE"
82 VTAB (15)··PRINT SPC(2) ; "33" ; SPC(3) ; "GRAPH ; SPC(7) ; "IN GRAPHIC
   PRINTER"
84 VTAB (17) : PRINT SPC(2) ; "44" ; SPC(3) ; DIFF. GR"
86 VTAB (19) : PRINT SPC(2) ; "55" ; SPC(3) ; O. D. VALUE
88 VTAB (23) : PRINT SPC(15); : INPUT "SELECT NO. : " ; P$
90 IF P$ ="O" THEN 164
```

```
92 IF P$ ="1" THEN 6
94 IF P$ ="2" THEN 64  96 IF P$ ="3" THEN 122
98 IF P$ ="33" THE N GOSUB 138 : PRINT "H" : PR# 0 : PRINT CHR$ (17) :
   GOTO 72
100 I F P$ ="4" THEN 130
102 IF P$ ="44" THEN GOSUB 152 : PR# 0 : PRINT CHR$ (17) : GOTO 72
104 IF P$ ="5 " THEN GOSUB 110 : GOSUB 112 : GOTO 72
106 IF P$ ="55" THEN GOSUB 110 : GOSUB 116 : GOTO 72
108 GOTO 72
110 PRINT "PRESS SPACE TO STOP" : RETURN
112 PRI NT : INPUT "WAVE LENGTH=" ; WL : IF WL=0 THEN RETURN
114 GOSUB 120 : PRINT "O. D." ; WL;" =" ; X$ : GOTO 112
116 PRINT : INPUT "WAVE LENGT H=" ; WL : IF WL=0 THEN RETURN
118 GOSUB 120 : WL$ =STR$ (WL) : PR# 1 : PRINT "O. D." ; WL ; SPC (6-LEN
    (WL$)) ; "=" ; PR# 0 : GOTO 116
120 Y=INT ((S-WL)/(S-T)* N+0.5) : Q=X%(Y)-O : GOSUB 360 : RETURN
122 INPUT "FOLD=" ; F : HGR2 : HCOLOR=3 : IF E=0 THEN 128
124 FOR J=0 TO E-1 : GOSUB 264 : GET P$ : HGR2 : NEXT J
126 GOSUB 266 : GET P$ : TEXT : GOTO 72
128 FOR Y=NS TO NT : GOSUB 470 : GOSUB 476 : GOSUB 480 : NEXT Y : PRINT
   CHR$ (7) : GET P$ : TEXT : GOTO 72
130 INPUT „V=" ; V : HGR2 : HCOLOR=3 : NS=NS+D : GOTO 132
132 IF E=0 THEN 136
134 FOR J=0 TO E-1 : GOSUB 268 : GET P$ : HGR2 : NEXT J : GOSUB 270 : NS-
   D : GET P$ : TEXT : GOTO 72
136 FOR Y=NS TO NT : Y+D/2 : GOSUB 478 : GOSUB 476 : Q=Q-D/2 : GOSUB 482 :
   Y=Y-D/2 : NEXT Y : PRINT CHR$ (7) : NS=NS-D : GET P$ : TEXT : GOTO
   72
138 INPUT "F=" : PRINT : INPUT "SCALE=" ; SC : INPUT "COLOR=" ; C : INPUT
   "LENGTH=? (>0 OR <0)" ; K
142 PR# 1 : PRINT CHR$ (18) : INPUT "C" : C : GOSUB 144 : RETURN
144 PRINT "M20, 0" : PRINT "X0," ; K* (NT-NS)/SC ;", " ; SC : PRINT "S1" : P
   RINT "Q1"
146 FOR I=0 TO SC : PRINT "Mo," ; K* ((NT-NS)/SC)* I+25 : PRINT "P" ; SI-I*
    (SI-TI)/SC
148 NEXT I
150 Y=NS : X=X%(NS)/G* F+20 : P RINT "M" ; X ; ", 0" : FOR Y=N S TO NT :
   X=X%(Y)/G* F+20 : PRIN T "D" ; X ; " , " ; (Y-NS)* K : NEXT Y : RETURN
152 INPUT "V=" ; V : PRINT : INPUT "SCALE=" ; SC : INPUT "COLOR =" ; C :
   INPUT "LENGTH=? (>0 OR<0)" ; K
156 PR# 1 : PRINT CHR$ (18) : PRI NT "C" ; C : GOSUB 158 : RETURN
158 PRINT "M240, 0" : PIRNT "X0, " ; K* INT ((NT-NS)/SC) ; " , " ; SC
```

```
160 X=(X% (NS+D)-X% (NS))*V* M+240 : PRINT "M" ; X ; " , " ; K* D/2 : FOR
    Y=NS+D TO NT : X=X%(Y)-X% (Y-D) : X=X* V* M+240
162 PRINT "D" ; X ; " , " ; (Y-NS-D/2)* K : NEXT Y : PRINT "H" : RETURN
164 HOME
166 VTAB (5) : PRINT"PRESS (A) FOR UP (Z) FOR DOWN"
168 VTAB (8) : PRINT" (/) FOR SET" : VTAB (10) : PRINT" (E) FOR END"
170 VTB (11) : PRINT" (F) FOR FAST MOVE"
172 VTAB (15) : PRINT "IF SOMETHING WRONG, JUST PRESS <CTRL>" : P-
    RINT : PRINT "<REST> THEN PRESS<GOTO 72>" : VTAB (23) : PRINT
    "PRESS ANY KEY TO START" : GET P$ : HOME
174 INPUT "F=" ; F : INPUT "V=" ; V : HGR2 : HCOLOR=3 : P=1 : NS=NS+D
176 IF E=0 THEN 182
178 FOR J=0 TO E-1 : FOR Y=NS +J* 279 TO NS+(J+1)* 279 : GOSUB 472 :
    GOSUB 500 : NEXT Y : GOSUB 376 : HGR2 : NEXT J
180 FOR Y=NS+E* 279 TO NT : GOSUB 474 : GOSUB 500 : NEXT Y : GOSUB 392 :
    NS=NS-D : GOTO 184
182 FOR Y=NS TO NT : GOSUB 476 : GOSUB 500 : NEXT Y : GOSUB 410 : NS=NS-
    D : GOTO 184
184 TEXT : HOME
186 VTAB (2) : PRINT SPC (3) ; "1" ; SPC (3) ; "EXIT"
188 VTAB (4) : PRINT SPC (3) ; "2" ; SPC (3) ; "REFREST"
190 VTAB (6) : PRINT SPC (3) ; "3" ; SPC (3) ; RESET WAVE RANGE"
192 VTAB (8) : PRINT SPC (3) ; "4" ; SPC (3) ; "PLOT GRAPH" : VTAB (10) :
    PRINT SPC (3) ; "5" ; SPC (3) ; PLOT DIFF. GR"
194 VTAB (12) : PRINT SPC (7) ; "PRINT MAX. (NM) & O. D. VALUE" : VTAB
    (1ｶ) : PRINT SPC (3) ; "6" ; SPC (3) ; "PRINT IN MONITOR"
196 VTAB (16) : PRINT SPC (3) ; "7" ; SPC (3) ; "PRINT IN LINE PRINTER"
198 VTAB (18) : PRINT SPC (3) ; "8" ; SPC (3) ; PRINT IN GRAPHIC PRINTER"
200 VTAB (23) : PRINT SPC (15); : INPUT "SELECT NO.:" : P$
202 IF P$ ="1" THEN 8
204 IF P$ ="2" THEN 72
206 IF P$ ="3" THEN 64
208 IF P$ ="4" THEN 238
210 IF P$ ="5" THEN 246
212 IF P$ ="6" THEN TEXT : HOME : GOSUB 254 : GET P$ : GOTO 184
214 IF P$ ="7" THEN TEXT : HOM E : GOSUB 258 : GOTO 184
216 IF P$ ="8" THEN 220
218 GOTO 184
220 PRf₁ 1 : PRINT CHR$ (18) : PRINT "Q1" : PRINT "S1" : PRIN T"C0"
222 PRINT "M460, 0" : PRINT "I" : PRINT "P" ; "NO." : PRINT "R0, -30" : PRINT
    "P" ; Peak (nm)" : PRINT "R0, -45" : PRINT" P" ; "O. D." : PRINT "H"
224 FOR J=1 TO P-1 : J$ =STR$ (J) : IF LEN (J$ )=1 THEN J$ =" "+J $
```

```
226 GOSUB 368 : GOSUB 360 : GOSUB 370 : GOTO 228
228 PRINT "M" ; -35* J ; ", 0" : PRI NT "P" ; PRINT "R0, -50 : PRINT" P" ; U$
230 PRINT "R0, -70" : PRINT "P" ; X$
232 NEXT J : PRINT "H" : PRINT " M-460, -350" : PRINT "I"
234 PRINT "C0" : PRINT "Q0"
236 PR# 0 : PRINT CHR$ (17) : GOTO 184
238 GOSUB 240 : PRINT "S1" : PR# 0 : PRINT CHR$(17) : GOTO 184
240 GOSUB 138 : FOR J=1 TO P-1 : X=X% (W(J))/G* F+10 : PRINT "M" ; X ; " , "
    ; (W(J)-NS)* K : PRINT "J20, 0, -20, 0".
242 GOSUB 370 : PRINT "R25," ; K* 1 : PRINT "S0" : PRINT "Q0" : PRIN T "P" ; J;"
    (" ; U$")"
244 NEXT J : PRINT "H" : RETURN
236 GOSUB 248 : PR# 0 : PRINT CH R$ (17) : GOTO 184
248 GOSUB 152 : FOR J=1 TO P-1 : X% (W(J))-X% (W(J)-D) : X=X* V* M+
    230 : PRINT "M" ; X ; " , " ; (W(J)-NS-D/2)* K
250 PRINT "J20, 0, -20, 0"
252 NEXT J : PRINT "H" : RETURN
254 FOR J=1 TO P-1
256 GOSUB 368 : GOSUB 360 : GOSUB 370 : PRINT"O. D." ; U$ ; " " ; X$ : NEXT J :
    RETURN
258 PR# 1 : PRINT "A" : PRINT SPC (2) ; "No." ; SPC (3) ; "Peak (nm)" ; SPC(3) ;
    "O. D."
260 ROR J=1 TO P-1 : J$ =STR$ (J) : IF LEN (J$)=1 THEN J$ =" "+J$
262 GOSUB 368 : GOSUB 360 : GOSUB 370 : PRINT SPC(2) ; J$ ; SPC(5) ; U$ ; SPC
    (6) ; X$ : NEXT J : PR# 0 : RETURN
264 FOR Y=NS+J* 279 TO NS+(J+1)* 279 : GOSUB 470 : GOSUB 472 : GOSUB 480 :
    NEXT Y : PRINT CHR$(7) : PETURN
266 FOR Y=NS+E* 279 TO NT : GOSUB 470 : GOSUB 474 : GOSUB 480 : NEXT Y :
    RETURN
268 FOR Y=NS+J* 279 TO NS+(J+1)* 279 : GOSUB 478 : GOSUB 472 GOSUB 482 :
    NEXT Y : PRINT CHR$ (7) : RETURN
270 FOR Y=NS+E* 279 TO NT : GOSUB 478 : GOSUB 474 : GOSUB 482 : NEXT Y :
    RETURN
272 HOME : VTAB(5) : PRINT SPC(3); : INPUT "TOTAL WAVE RANGE (nms)?" ;
    WR : N=RS* WR : RETURN
274 HOME : VTAB (5) : INPUT "INI TIAL WAVELENGTH=" ; S
276 PRINT : PRINT "FINAL WAVELENGTH=" ; T
278 HOME : VTAB (5)
280 INPUT "A=" ; A : PRINT : INPUT" B=" ; B : PRINT : INPUT" O. D.=0 X%(Y)
    =" ; O
282 PRINT : PRINT : INPUT"SAMPLE NAME=" ; N$ : PRINT : INPUT "DATE=" ;
```

```
D$ : GOTO 36
284 PRINT "SAMPLE : " ; N$ PRINT "DATE : " ; D$ : PRINT : PRINT "A=" ; INT
    (A* 100)/100 ; SPC(7) ; "B=" ; INT (B* 100)/100
286 PRINT "at O. D.=0 X%(Y)=" ; O
288 PRINT "INITIAL WAVELENGTH:" ; S : PRINT "FINAL WAVELENGTH:" ; T :
    PRINT : RETURN
290 S%=0 : FOR I=1 TO 50 : S%=S %+PDL (2) : NEXT I : Q=INT ((6500-S%)/130*
    0.85) : FOR J=0 TO Q : NEXT J : X%(Y)=S%
291 PRINT X%(Y) : RETURN
292 PRINT "PRESS ANY KEY TO START" : GET P$ : FOR Y=0 TO N : GOSUB
    290 : NEXT Y
294 FOR K=1 TO 20 : PRINT CHR$ (7);NEXT K : RETURN
296 P%(0)=N : P%(1)=A : P%(2)=B
298 P%(3)=O : P%(4)=S : P%(5)=T
300 W$(0)=N$ : W$(1)=D$
302 GOSUB 308 : GET P$ : STORE P%
304 GOSUB 308 : GET P$ : STORE W$
306 GOSUB 308 : GET P$ : STORE X% : RETURN
308 PRINT "STORE DATA TO TAPE, PRESS<CR>KEY" : RETURN
310 GOSUB 324 : GET P$ : RECALL P%
312 GOSUB 324 : GET P% : RECALL W%
314 GOSUB 324 : GET P% : RECALL X%
316 N=P%(0) : A=P%(1) : B=P%(2) : O=P%(3)
318 S=P%(4) : T=P%(5)
320 N$=W$(0) : D$=W$(1)
322 RETURN
324 PRINT "GET "DET DATA FROM TAPE, PRESS<CR>KEY" : RETURN
326 O$=CHR$ (4) +"OPEN"
328 C$=CHR$ (4) +"CLOSE"
330 R$=CHR$ (4) +"READ"
332 W$=CHR$ (4) +"WRITE"
334 PRINT O$ ; T$ : RETURN
335 PRINT CHR$ (4) ; "CATALOG"
336 PRINT : PRINT : INPUT "FILE NAME OF DATA=" ; T$
338 GOSUB 326 : PRINT R$ ; T$
340 INPUT N, A, B, O, S, T, N$, D$
342 FOR Y=0 TO N : INPUT X %(Y)
344 NEXT
346 PRINT C$ ; T$ RETURN
348 PRINT : PRINT : INPUT "FILㅋNAME OF DATA= ; "T$
350 GOSUB 326 : PRINT W$ ; T$
352 PRINT N : PRINT A : PRINT B : PRINT O : PRINT S : PRINT T : PRINT N$
    ; PRINT D$
```

```
354 FOR Y=0 TO N : PRINT X%(Y)
356 NEXT
358 PRINT C$ ; T$ : RETURN
360 X=Q/A : FOR K=1 TO 4 : X=X+(Q-A*X-B*X*X)/(A+2*B*X) : NEXT K : X=
    INT(X* 1000+0.5)/1000
362 X$ =STR$(X) : IF 1>X THEN X$ ="0"+X$ : RETURN
364 IF X-INT (X)=0 THEN X$ = X$ +"0" : RETURN
366 RETURN
368 Q=X%(W(J))-O : RETURN
370 U=INT ((S-W(J)* (S-T)/N)* 10+0.5)/10
372 IF U-INT (U)=0 THEN U$ =TR$ (U)+"0" : RETURN
374 U$ =STR$(U) : RETURN
376 FOR Y=NS+J* 279 TO NS+(J+1)*279
378 GOSUB 472 : GOSUB 490
380 GET P$
382 IF P$ ="/" THEN GOSUB 484 : NEXT Y
384 IF P$ ="A" THEN HCOLOR=0 : GOSUB 490 : HCOLOR=3 : GOSUB 492 : Y=Y-
    1 : GOTO 378
326 IF P$ ="F" THEN HCOLOR=0 : GOSUB 490 : HCOLOR=3 : GOSUB 492 : Y=Y+
    5 : GOTO 378
388 IF P$ ="Z" THEN HCOLOR=0 : GOSUB 490 : HCOLOR=3 : GOSUB 492 : NEXT
    Y : GOTO 482
390 IF P$ ="E" THEN HCOLOR=0 : GOSUB 490 : HCOLOR=3 : GOSUB 492 : GOTO
    428
392 FOR Y=NS+E* 279 TO NT
394 GOSUB 472 : GOSUB 490
396 GET P$
398 IF P$ ="/" THEN GOSUB 484 : NEXT Y
400 IF P$ ="A" THEN HCOLOR=0 : GOSUB 490 : HCOLOR=3 : GOSUB 492 : Y=Y-
    1 : GOTO 394
402 IF P$ ="F" THEN HCOLOR=0 : GOSUB 490 : HCOLOR=3 : GOSUB 492 : Y=Y+
    5 : GOTO 394
404 IF P$ ="Z" THEN HCOLOR=0 : GOSUB 490 : HCOLOR=3 : GOSUB 492 : NEXT
    Y : GOTO 442
406 IF P$ ="E" THEN HCOLOR=0 : GOSUB 490 : HCOLOR=3 : GOSUB 492 : GOTO
    442
408 GOTO 396
470 X=191-X%(Y)/G* F : RETURN
472 Q=Y-NS-J* 279 : RETURN
474 Q=Y-NS-E* 279 : RETURN
476 Q=Y-NS : RETURN
478 X=(X%(Y)-X%(Y-D))* V* M : X=95-X : RETURN
```

```
480 HPLOT Q, X : RETURN
482 HPLOT Q, 95 : HPLOT Q, X : RETURN
484 HPLOT Q, 181 TO Q, 191 : RETURN
486 HPLOT Q, X-5 TO Q, X+5 : RETURN
488 HPLOT Q, 188 TO Q, 191 : RETURN
490 GOSUB 470 : GOSUB 486 : Y=Y+D/2 : GOSUB 478 : GOSUB 486 : Y=Y-D/2 :
    RETURN
492 GOSUB 470 : GOSUB 480 : Y=Y+D/2 : GOSUB 478 : GOSUB 482 : Y=Y-D/2 :
    RETURN
494 GOSUB 472 : GOSUB 482 : RETURN
496 GOSUB 474 : GOSUB 488 : RETURN
498 GOSUB 476 : GOSUB 488 : RETURN
500 GOSUB 470 : GOSUB 480 : Y=Y+D/2 : GOSUB 478 : GOSUB 482 : Y=Y -D/2 :
    RETURN
```

結果與討論

一、吸光密度值校正曲線程式：

此程式之功能爲求出分光光度計輸出電壓轉換成之數值與吸光密度值之關係。其處理過程包括：

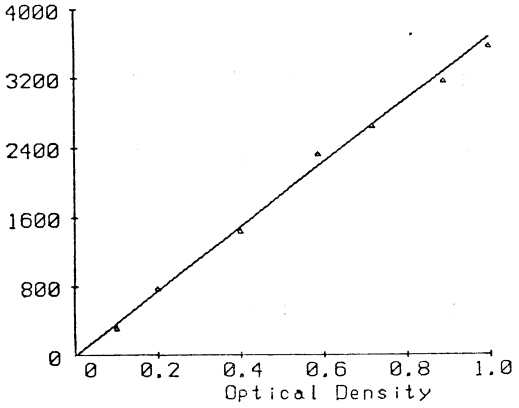
（一）將儀器輸出電壓（約（1—10mV））經轉換器轉成數值後，記錄其讀數。

（二）給予數個吸光密度值（Absorbance 或 Optical Density，簡稱 O. D.），並將對應之數值讀取50次，再印出其平均值（圖 2）。

（三）將吸光密度值（X）與讀數（Y）代入 $Y=AX+BX^2$ 公式，則由螢幕上可以顯出兩者之關係曲線；亦可由繪圖器印出（圖 2）。此曲線即可作爲計算特定波長之吸光密度值用標準曲線。

（四）經由程式處理迅速計算出 A, B 值。

（五）此校正曲線係通過原點，因此 O. D. 爲 O 時之讀數亦與 A, B 值一併印出。




```
O.D.= 0          Xx(1)=   703.2
O.D.= 0.1        Xx(2)=  1050.0
O.D.= 0.2        Xx(3)=  1505.7
O.D.= 0.4        Xx(4)=  2182.3
O.D.= 0.59       Xx(5)=  3060.6
O.D.= 0.72       Xx(6)=  3372.8
O.D.= 0.89       Xx(7)=  3899.9
O.D.= 1          Xx(8)=  4303.0
A = 3784.49       B = -107.24
Xx(I)-Xx(1)=A*O.D.(I)+B*O.D.(I)*O.D.(I)
```

Table 2. Calibtation curve for optical density and digital reading

圖二：吸光密度值校正曲線

二、光譜資料儲存與處理程式：

此程式於操作時，操作指令均由螢幕監視器顯示，其功能包括：

（一）將光譜資料由分光光度計，磁碟或磁帶（即一般卡氏錄音帶）擇一輸入。已儲存於磁碟或

磁帶中之資料可以不限時間、地點及次數加以處理。

（二）將已輸入 CPU 內之資料轉存於磁碟或磁帶中，可做永久性保存，亦可將原始資料加以拷貝或以其它方式儲存。

（三）對一光譜資料可加以標示，如樣本名稱、分析日期、記錄波長範圍等，且可與該光譜同時儲存不必另行記錄，不易發生樣本標示與光譜圖混淆情事。此標示記錄可隨光譜一併打印出（圖3、10、11）。若標示資料須加修改時可按 <CTRL-C> 與 <GOTO 274> 後即可輕易更改及轉存（圖10、11）。

（四）欲掃描之波長範圍可隨意設定（圖3、5、10），且適用可見光及紫外光。在每分鐘30nm之掃描速度下，使用此程式可記錄約 500nm ，每一 nm 讀取約4.4個數值。波長刻度爲 0.2nm。

（五）光譜資料可以依吸光密度值或透光率值（Percent Transmission）加以記錄（圖3及圖4）。

（六）對於一光譜資料可做多元化繪圖處理，例如任意選擇波長範圍（圖3、6、7）；將吸光值或透光率進行不同比例值（F值）放大（圖5、6、7）；任意選擇方向及圖形寬度放大比例（Leng 值）、波長間隔刻度（Scale 值）與繪圖筆顏色（Color 值）等（圖3、4、6、8）；此外，亦可將光譜進行一次微分處理，此微分譜可與原光譜並列繪出（圖7、8）；對於任一圖形均可做多次繪圖；繪圖部分可由螢幕顯示或由繪圖器印出。

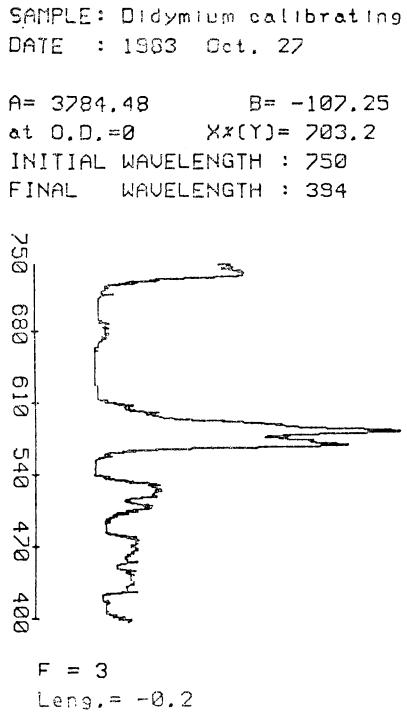


Table 3 ·Absorption spectrum of didymium filter (750-400 nm.)

圖三：Didymium filter 之可見光吸收光譜

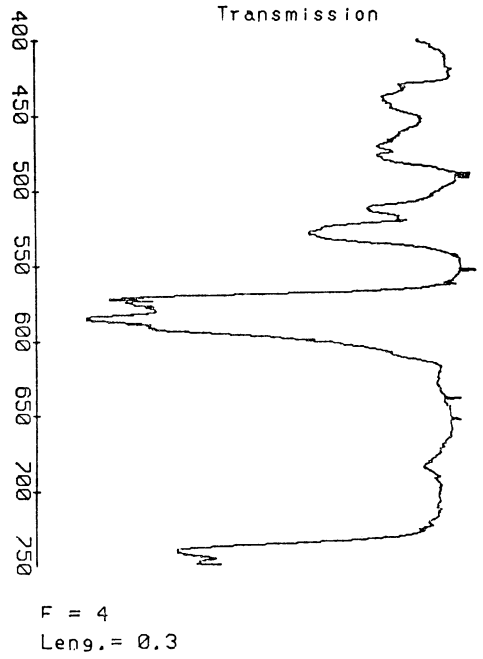


Table 4. Absorption spectrum (transmission) of didymium filter (400-750nm.)

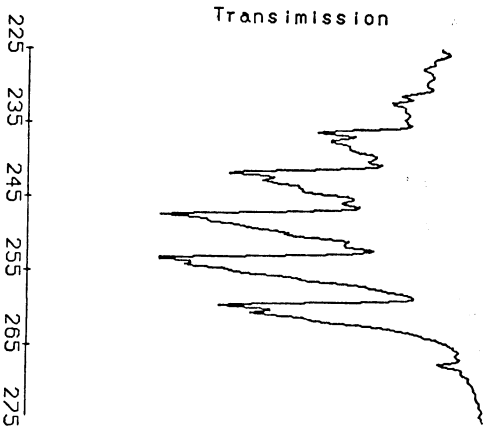
圖四：Didymium filter 之可見光吸收光譜（透光率表示）

（七）具有尋找最大吸收波長之功能（其操作指令由螢幕顯示），已找出最大吸收波長後可予記錄並計算該波長之吸光密度值（參考圖9與圖10），前（6）項中敍述之功能於此亦可適用。

（八）給予一指定波長時，可以立即計算出吸光密度值，由螢幕顯示或打印出（表1），欲停止

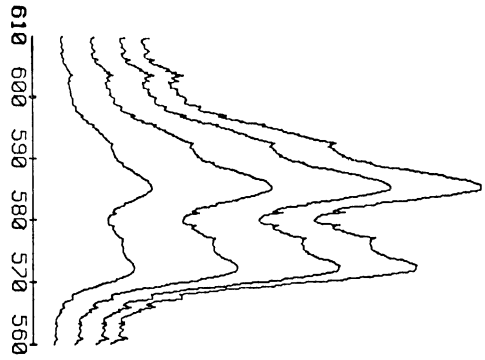
SAMPLE: Benzene vapor
DATE : 1983 12/14

A= 4095.5 B= -200.61
at O.D.=0 Xx(Y)= 600
INITIAL WAVELENGTH : 275.5
FINAL WAVELENGTH : 224.5



F = 4
Leng.= 1.5

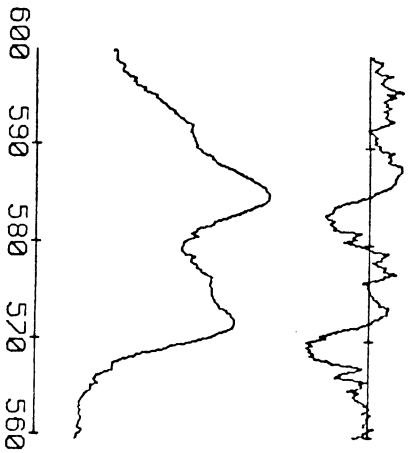
Table 5. Absorption spectrum (transmission) of benzene Vapor (225—275nm.)
圖五：苯蒸氣之紫外光吸收光譜



F = 1,2,3,3.75
Leng.=-1.25

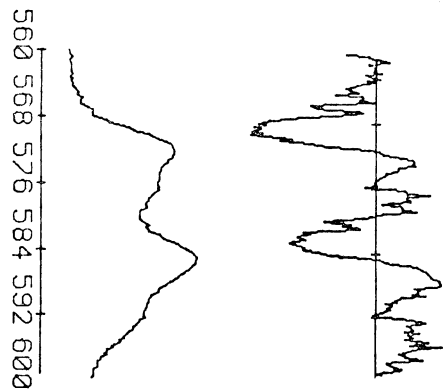
Table 6. Absorption spectrum of didymium filter (610—560nm)

圖六：Didymium filter 之可見光吸收光譜（波長 610—560nm，放大 1、2、3、3.75倍）



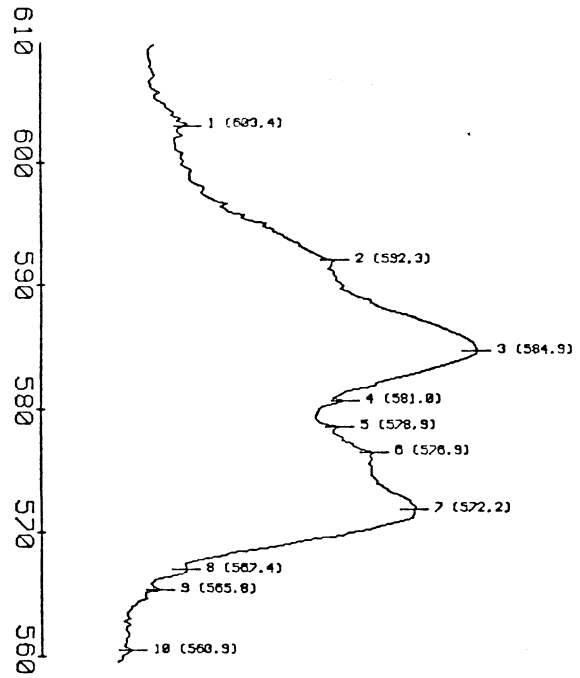
F = 1.5 U = 1
Leng.= -1.5

Table 7. Absorption and differential spectrum of didymium filter (600—560nm.)
圖七：Didymium filter 之可見光吸收光譜及其一次微分譜（600—560nm）



F = 1 U = 2
Leng.= 1.25

Table 8. Absorption and differential spectrum of didymium filter (560—600nm.)
圖八：Didymium filter 之可見光吸收光譜及其一次微分譜（560—600nm）



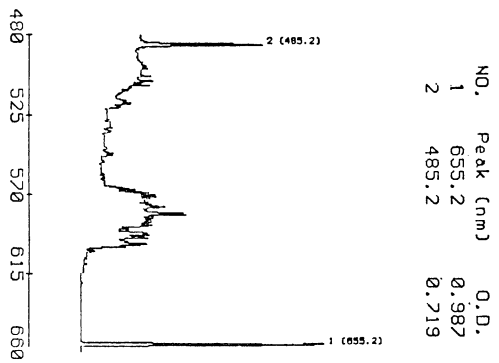
NO.	Peak (nm)	O.D.
1	603.4	0.281
2	592.3	0.754
3	584.9	1.218
4	581.0	0.786
5	578.9	0.765
6	576.9	0.879
7	572.2	1.008
8	567.4	0.271
9	565.8	0.192
10	560.9	0.105

Table 9. Absorption spectrum of didymium filter (610—560nm) with indicated peak absorption wavelength

圖九：Didymium filter 之可見光吸收光譜 (610—560 nm)

```
SAMPLE: Deuterium lamp(1)
DATE  : 1983 Oct. 20

A= 4095.5        B= -200.62
at O.D.=0      X*(Y)= 850
INITIAL WAVELENGTH : 670
FINAL   WAVELENGTH : 467
```



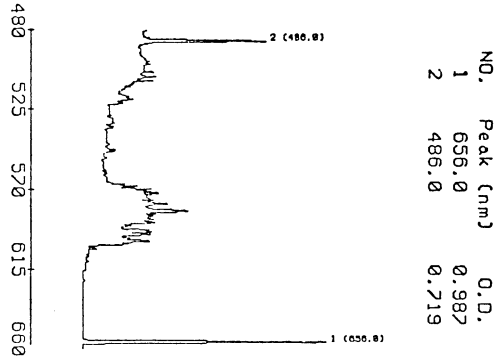
NO.	Peak (nm)	O.D.
1	655.2	0.987
2	485.2	0.719

Table 11. Energy spectrumo of deuterium lamp (1)

圖十：重氫燈之能量譜（1）

```
SAMPLE: Deuterium lamp(2)
DATE  : 1983 Oct. 20

A= 4095.5        B= -200.63
at O.D.=0      X*(Y)= 850
INITIAL WAVELENGTH : 670.8
FINAL   WAVELENGTH : 467.8
```



NO.	Peak (nm)	O.D.
1	656.0	0.987
2	486.0	0.719

Table 10. Energy spectrum of deuterium lamp (2)

圖十一：重氫燈之能量譜（2）

表一：特定波長之吸光密度值

Table 1. Some detected data showing wavelength and optical density

O. D. 655.8 = 0.867
O. D. 655.9 = 0.867
O. D. 656 = 0.987
O. D. 656.1 = 0.987
O. D. 656.2 = 0.863
O. D. 656.3 = 0.863

O. D. 485.9 = 0.678
O. D. 485.9 = 0.678
O. D. 486 = 0.719
O. D. 486.1 = 0.719
O. D. 486.2 = 0.644
O. D. 486.3 = 0.644

此項操作時，輸入任一文字鍵即可。由執行此程式得到的 O. D. 值較用目測儀表刻度或由記錄紙量度之結果快而精確。本軟體設計中所採用之有效數字爲小數點後三位。若要改變有效位數時僅須將行號360中之數字1,000加以修改即可。又，由表 1 之吸光密度值及波長值可以看出每 0.2nm 讀取一讀數。

（九）可輕易地校正分光度計之正確波長。重氫燈（Deuterium Lamp）在可見光範圍之最大能量吸收波長爲656.1及 480.6nm。此分光光度計之重氫燈能量譜程式處理後發現其最大吸收分別爲655.2及 485.2nm （圖10），顯示其波長刻度位移約 0.8nm 。校正方法則爲在讀取光譜資料時，自行將波長刻度加以調整，或者將已有之光譜資料標示中之波長範圍加以修改即可（圖11）。經校正後之重氫燈能量最大吸收波長則爲 656.0 與 486.0nm ，與標準值相符。又，經多次以校正濾光玻璃試驗結果，確定波長精確度爲全波長型之±0.1nm。

（十）對於需要測定時間效應之化學或生化反應，僅需將軟體稍做修改即可適用。程式行號64、72、112、116、190、272、274、288，中之 WAVE 或 WAVE LENGTH 字樣改爲 TIME ；行號64、194、222、258中之 NM. 改爲SEC. 或 MIN ；行號66之 SI 改爲 TI, TI 改爲 SI ；行號274之 S 改爲 T；行號 276 之 T 改爲 S 即可。又，目前使用爲每秒讀取約 2.2 個數值，可記錄約1,000秒。若欲改變每秒讀數與擴充記錄時間長度時，行號 4 與行號 290 中之 RS 及 Q 值需加更改。

本軟體之設計在於使用廉價之家用電腦處理紫外——可見光分光光譜資料以達到電腦化，普遍化及簡易化之目的。經實際操作結果顯示：光譜及樣本資料之輸入及或儲存轉存操作簡易；吸光密度值讀取容易且精確；波長校正容易而準確；分光光譜及其一次微分譜皆可由螢幕呈式或打印出；由印出器印出時尚有效放大比例、方向、刻度比例、繪筆顏色等多種選擇性功能；可藉尋找方式求得最大吸收波長及其吸光密度值。

參考文獻

1. L. Poole, M. McNiff & S. Cook (1981): Apple II User's Guide Osborne/McGrew-Hill Inc., Barkeley, California.

Program Design for Personal Compute Used as a Data Station

(I) UV—Vis Spectrophotometer[1]

Huey-Ing Liu and Lan-Ti Lee[2]

Summary

Personal computer (APPLE II PLUS compatible) was used as a data station for UV-Vis spectrophotometer through theprograms designed with the following features:

(1) taking sample and spectrum data either from spectrophptometer, tape or diskette;
(2) storing data on diskette or tape;
(3) recording optical density;
(4) correcting wavelength;
(5) plotting differential spectrum;
(6) plotting spectrum by changing enlarge ratio, scale ratio, wave range, direction and pen color;
(7) searching peak wavelength.

It shows a great flexibility of using personal computer as a data processing tool in instrumentation. The possibility of modifying the programs for other situations with simillar purpose is obious.

1. Contribution No. 1165 from the Taiwan Agricultural Rese arch Institute.

2. Assistant Chemist, Department of Agricultural Chemistry and Head Instrumental Aualysis Laboratory, respectively, TARI, Wufeng, Taichung Hsien, Taiwan 431, ROC.