红外光谱信息管理系统[1]

谢狄霖[1]，　李勇波[2]，　陈 忠[3]
（1. 福建省医学科学研究所，　福建 福州 350001　2. 福建省地质测绘院，福建 福州 350001
3. 厦门大学 化学系，　福建 厦门　361005）

摘要：本文介绍了光谱数据库系统的程序设计思想和技术关键。数据库系统包含纯化合物红外光谱约 9 万张，高聚物红外光谱 1.2 万张，药品红外光谱 1 千张，以及核磁共振谱 10 万多张。可以按光谱编号、化学名、商品名、原子数、分子式进行查询，还能根据未知物光谱图的谱峰形状进行检索。结果得到未知化合物的相关信息及其标准谱图。

关键词：红外光谱　核磁共振谱　数据库

1．系统简介　红外光谱常作为“分子指纹”广泛应用于分子结构研究和物质种类的鉴别。未知物红外光谱与标准红外光谱图之间的峰-峰匹配，即“指纹”核对，通常是鉴别化合物的有效方法。如今人类已积累了大量标准物质的光谱图集，许多已成为光谱实验室的必备工具书。近年来，国外已有人研制出各种红外光谱的计算机检索软件和数据库供出售或出租，但通常平均每张光谱要 1 美元，远非国内一般单位所能购买得起的。鉴此，我们进行了红外光谱信息管理系统的开发研究。该系统数据库目前包括纯化合物红外谱图 9 万张，高聚物红外谱图 1.2 万张，药品红外谱图 1 千张。另外还有纯化合物核磁共振氢谱库 10 万多张。它们可以分别按光谱编号、化学名、商品名、原子数、分子式进行查询并显示图形，还可以根据未知样品红外光谱图的谱峰形状进行比较检索。

整个系统包括光谱信息数据输入建库模块，光谱信息查询模块和光谱图谱峰检索模块；还包括光谱信息数据库，光谱谱峰代码条数据库和光谱图形数据库。系统采用 VB 编程语言编写而成，在 Windows 平台上运行。光谱信息数据库和光谱图形数据库用 Access 软件进行管理。

2．光谱信息管理　光谱信息输入建库模块用于输入各标准红外光谱图的各种信息数据，包括光谱编号、化学名、商品名、原子数、分子式和光谱图，用于建立光谱信息数据库和光谱图形数据库以供查询。用户可利用本模块将本专业的一些光谱的信息以及图形添加进数据库备查。

光谱信息查询模块可以根据需要按光谱编号、化学名、商品名、原子数或分子式进行查询，得到所需的光谱的各种信息及光谱图。查询结果的显示界面如图 1 所示，勾选“显示图象”前的白框即可显示中选的谱图。

[1] 作者简介：谢狄霖（1945 年生），　男，研究员，　理学硕士。Tel: 13615050830,　Email: xiedilin@sohu.com

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

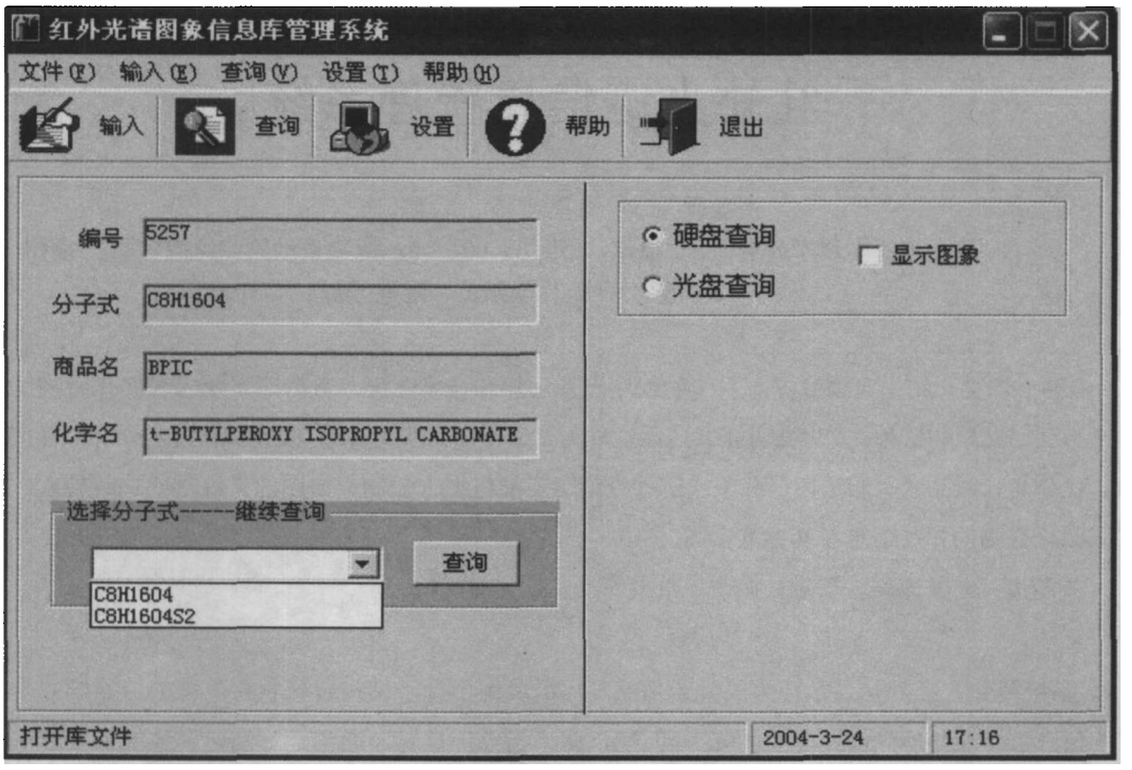

图 1. 光谱信息查询结果的显示界面

3. 光谱谱峰检索 光谱图谱峰检索模块能够根据未知光谱图的谱峰形状进行检索。系统采用谱峰编码的方法实现光谱图形的数字化。整个图谱分别以 200 cm^{-1} 或 100 cm^{-1} 为间隔划分区段，然后利用各区段内最强吸收峰的波数的十位数字编制代码，使每张红外光谱用 21 个码元素来表示。这样编制的代码条不仅包含有光谱特征峰的峰位信息，而且也隐含了它们的相对峰强信息，反映了光谱图形的主要特点[3]。全部代码条数据文件以图谱的最强吸收峰的波数值为主分叉，分成 96 个子数据库以随机文件的形式存于谱峰代码条数据库中。谱峰检索按峰一峰比较的方式进行，找出图谱数据库中谱峰形状最相近的若干种化合物。

用户只需根据提示由键盘输入未知物光谱中各主要吸收峰的峰位和峰强数据即可用于检索。结果列出库中与未知物光谱形状最相近的若干种化合物的相似性得分、光谱编号、状态和分子式，用鼠标双击某个中选的化合物便可显示出其光谱图形供比较确认。如果对检索结果不满意，用户可以查看样品光谱的初始数据，系统会提示各种可能的调整某些参数后回头再检索的方案供用户选用，直至得出满意的结果，从而大大提高检出率。谱峰检索结果的显示界面如图 2 所示。

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

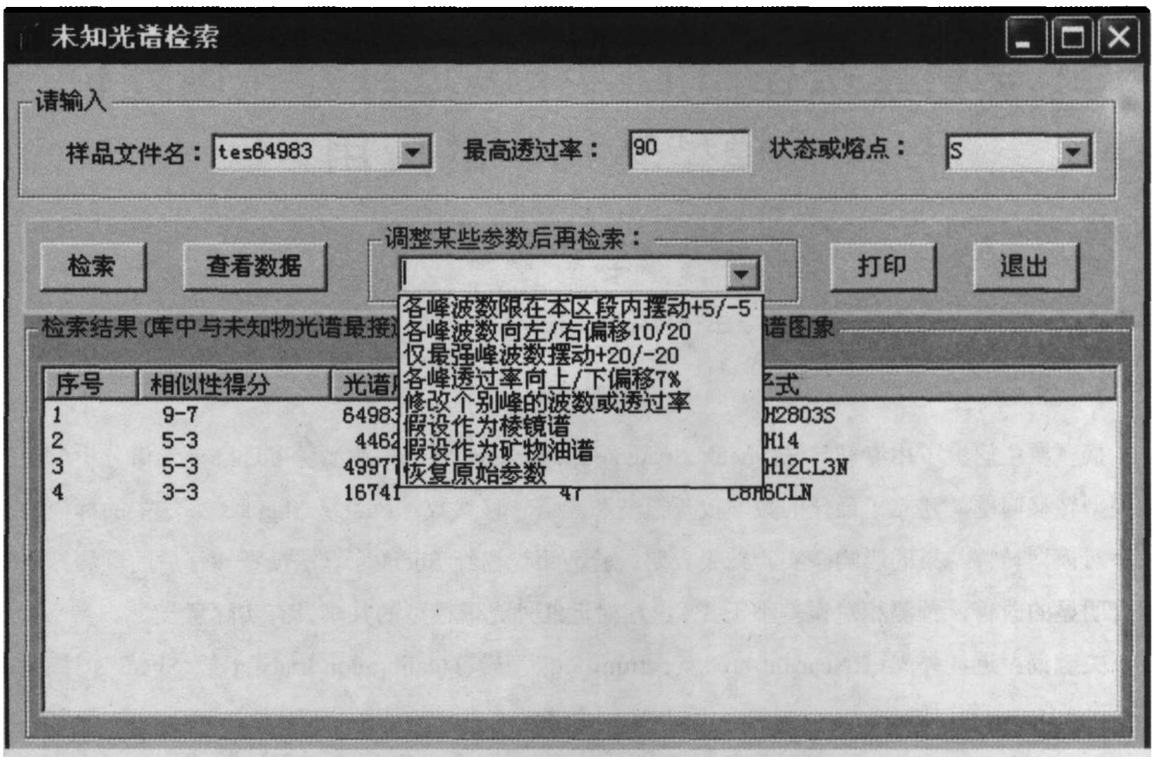

图 2. 谱峰检索结果的显示界面

参考文献

[1] Sadtler Research Laboratories. IR Grating Collection Cumulative Spec-Finder Index. Philadelphia, U. S. A. , 1980

[2] 中华人民共和国卫生部药典委员会. 药品红外光谱集. 武汉: 1990

[3] 谢狄霖，林积荣，张水冰. 化学通报，10:53, 1989

Infrared Spectrum Information System

XIE Dilin [1], XU Yongbo[2], CHEN Zhong [3]

(1. Medical Science Research Institute of Fujian Province, Fuzhou, 350001, China;
2. Fujian Mapping Institute, Fuzhou, 350011, China;
3. Department of Chemistry, Xiamen University, Xiamen, 361005, China)

Abstract: The infrared spectra of pure compounds of more than ten thousand and nuclear magnetic resonance spectra of compounds of more than ten thousand were included in the data bank. All of them can be searched out according to their serial number, chemical name, commercial name, amount of each atoms, or molecular formula, as well as their spectrum peak appearances. Program for spectrum information inputting, program for spectrum information search and program for spectrum peak-peak match were included in the system; in addition, spectrum information data bank, spectrum peak code data bank and spectrum figure data bank were attached to the system. System program was written by Visial Basic, and run under Windows system. The spectrum information data bank and spectrum figure data bank were administrated by Microsoft Access.

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net