



中华人民共和国国家标准

GB/T 21007—2007/ISO 14975:2000

表面化学分析 信息格式

Surface chemical analysis—Information formats

(ISO 14975:2000, IDT)

2007-07-26 发布

2008-03-01 实施

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局 发布
中国国家标准化管理委员会

目 次

前言	I
引言	II
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 符号和缩写术语	1
5 信息格式的描述	1
5.1 总则	1
5.2 附加规则和定义	2
5.3 格式	2
附录 A (资料性附录) 格式中特定条目实例	8
附录 B (资料性附录) 格式化的数据实例	10
参考文献	15

前 言

本标准等同采用 ISO 14975:2000《表面化学分析 信息格式》(英文版)。

本标准等同翻译 ISO 14975:2000。为了方便使用,本标准做了下列编辑性修改:

——用小数点符号“.”代替小数点符号“,”;

——用“本标准”代替“本国际标准”。

本标准的附录 A 和附录 B 为资料性附录。

本标准由全国微束分析标准化技术委员会提出并归口。

本标准起草单位:中国科学院金属研究所。

本标准起草人:龚沿东、孙爱芹、马永会、杨飞雪、张兵、宋小平。

引 言

GB/T 19499—2004/ISO 14976:1998 提供了一个沟通表面化学分析数据的数字化数据传输格式。由于在许多科学领域中数据库的重要性正在增长,数据库中的谱数据的存储和操作就显得很必要。GB/T 19499—2004/ISO 14976:1998 的结构适合于传输,但是数据库操作却与数据通讯有很大不同。GB/T 19499—2004/ISO 14976:1998 未包含的信息对于数据库中的数据操作是必要的,因此本标准提出了三个格式,即定义了信息包:(1)试样信息、(2)校准信息和(3)数据处理信息。它们对数据库中的谱数据操作来说是重要的。该格式必须兼顾未来的兼容性。本格式被设计成与 GB/T 19499—2004/ISO 14976:1998 协同使用,以便在添加这些信息包以后,设计用于读取后者数据的软件仍然能够正确地运行,所以本标准是对 GB/T 19499—2004/ISO 14976:1998 的增补并与其兼容。

在选择本标准中描述的数据文件所定义文本样式时,其目的是重要的。为了使程序员能够容易地在新软件中可靠地运行格式,需要遵循 Microsoft Windows™“.INI”文件结构的形态。大多数现代计算机都有这样的工具,它们通过 Windows 应用编程接口(Windows Application Programming Interface™)在广泛的计算机语言范围内读写本格式。

表面化学分析 信息格式

1 范围

本标准规定了一个补充 GB/T 19499—2004/ISO 14976:1998 的格式,用于产生、扩展和修正表面化学分析谱数据库的数据传输。这个格式应用于俄歇电子能谱(AES)和 X 射线光电子能谱(XPS)的谱数据。

2 规范性引用文件

下列文件中的条款通过本标准的引用而成为本标准的条款。凡是注日期的引用文件,其随后所有的修改单(不包括勘误的内容)或修订版均不适用于本标准,然而,鼓励根据本标准达成协议的各方研究是否可使用这些文件的最新版本。凡是不注日期的引用文件,其最新版本适用于本标准。

GB/T 19499—2004 表面化学分析 数据传输格式(ISO 14976:1998, IDT)

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本标准。

3.1

谱数据库 spectral database

可回读的谱数据集合。

3.2

信息 information

关于试样和(或)分析器校准的步骤和(或)数据处理步骤的信息,和(或)生成谱数据库的必要信息。

3.3

包 package

对谱数据所含信息进行描述的文本行集合。

4 符号和缩写术语

CAS——化学文摘服务处(Chemical Abstracts Service)。

DTF——数据传输格式(如同在 GB/T 19499—2004/ISO 14976:1998 中所指定的)。

IUPAC——国际纯粹和应用化学联合会(International Union of Pure and Applied Chemistry)。

N/A——不适用(not applicable)。

5 信息格式的描述

5.1 总则

信息被插入到 DTF 的注释行中或以包的形式附加在 DTF 中。其结果是,现存的 DTF 可以不加修改地作为信息包的载体而被使用;这些包占用 DTF 中的实验注释行或者数据块注释行,或者在 DTF 之外构造块。

在这种结构下,那些利用信息包的读取程序可以寻找格式标识符,这些标识符可以存在于适用全部数据块的实验注释行,也可以存在于仅仅适用一个数据块的数据块注释行,或者存在于 DTF 之外。现存的读取程序将把这些包向阅读者解释为注释,并忽略掉它们。

本标准描述了“试样信息格式”、“校准信息格式”和“数据处理格式”的信息包。它是一个模块化的