

Datei : SPEKTRUM.DOC

-----

#### Programmbeschreibung:

-----

berechnet das HFS-Spektrum eines Elementes in Abhängigkeit der A- und B- HFS-Konstanten bei bekannten Drehimpulseigenwerten (  $J$  = Hüllendrehimpuls,  $I$  = Kernspin ).

Die F-, K-, W-Energiewerte für jeweils den unteren bzw. oberen Zustand sowie die Übergangsenergien  $E(F_u, F_o)$ , unter Beachtung der Auswahlregeln (  $F_o - F_u = 0, +1, -1$ , mit entsprechenden Intensitäten werden berechnet und ausgegeben.

An die Linien lassen sich Lorentz- bzw. Gaussprofile fitten und ausgeben, oder auf Wunsch als Summenprofil am Bildschirm oder auf dem Drucker anzeigen lassen.

Für die Druckerausgabe benötigt man bei der HERCULES-Karte das Systemprogramm HGC.COM mit den Optionen (HGC FULL HPRINT). Hiernach ist der residente Teil des Print-Screen Hardcopy-Programms auf die Grafikseite "umgebogen", und bei Drücken der Tastenkombination <Shift> + <Prt-Sc> + n erscheint ein Hardcopy auf dem jeweils angeschlossenen Drucker, der Ausdruck erfolgt im Format DIN A4:

(  $n = 0$ , Ausdruck der ersten Grafikseite )  
(  $n = 1$ , Ausdruck der zweiten Grafikseite )

Für weitere Informationen siehe SPEKTRUM.TXT

(C) 1986/1987 Institut für Angewandte Physik  
der Universität Bonn

#### Autoren:

-----

Thomas Fabula, Wolfgang Rupprecht  
( njsymbol.inc : Thomas Brenner )

#### Parameterbereiche:

-----

A-, B-Faktoren : 1 - 9999 [MHz]  
I, J Drehimpulse : 0.5 - 99 [h]  
Untergrund : 0 - 999 [MHz]  
FWHM : 1 - 999 [MHz] ( bei Gauss > 500 [MHz] )  
Auflösung : 100 - 5000 Punkte ( ACHTUNG: max. 5000 ! )

#### Programmiersprache:

-----

Turbo-Pascal, Version 3.01A (opt. 8087-Coprozessor)

#### Betriebssystem:

-----

IBM PC-DOS, Version 3.10

#### Grafikkarte:

-----

HERCULES, CGA, EGA abhängig von der Borland Include-Datei für die Grafikroutinen GRAPHIX.SYS

#### Drucker:

-----

Alle IBM-kompatible Drucker, die vom HGC Treiberprogramm unterstützt werden (EPSON FX 80/100, NEC P6, etc...)

#### Bemerkungen:

-----

Die Auflösung der Spektren (=Anzahl der Punkte) geht stark in die Dauer der Rechenzeit ein. Es empfiehlt sich die Auflösung für Testberechnungen auf 1000-2000 zu setzen. ( Bei 4.77 MHz Systemtakt sollte man noch kleinere Werte wählen...)

Sollte das Programm bei der Berechnung aussteigen, und der Rechner sich verabschieden, aber hierbei im Grafik-Modus verbleiben, so muss das HERCULES Utility-Programm HFIX.COM aufgerufen werden, um die Grafik- & Textseite zu restaurieren.

Ersatz kann auch ein selbstgeschriebenes Programm leisten, welches lediglich mit InitGraphic; die Grafikseite erneut initialisiert und mit LeaveGraphic; sie wieder verl,ät. ( Beispielpogramm: HFIXT.COM )

#### Benötigte Dateien:

-----

SPEK	BAT	: Batch-Datei für SPEKTRUM
S	PAS	: Source des Hauptprogramms
S	COM	: Ausführbares SPEKTRUM-Programm
S87	COM	: Ausführbares SPEKTRUM-Programm (8087/80287)
SPEKTRUM	DAT	: Letztgültige Protokolldatei
SPEKTRUM	DEF	: Definitionsfile für EPSON Drucker
SPEKTRUM	TXT	: Benutzerinfo (ASCII-Datei)
SPEKTRUM	DOC	: ...diese Datei
SPEKTRUM	PAR	: letztgültige Parameter
SPROFIL	PAR	: letztgültige Profilparameter
SDECLARE	INC	: Include-Datei für Deklarationen
SFILE	INC	: Include-Datei für I/O
SPARAM	INC	: Include-Datei für Parameter einlesen
SFUNCT	INC	: Include-Datei für zus. Funktionen
SRECHNE	INC	: Include-Datei für Berechnungen
SPROFIL	INC	: Include-Datei für Lorentz/Gauss-Profilberechnung
SREALIN	INC	: Include-Datei für REAL-Zahl einlesen
PLOTTER	INC	: Include-Datei für Plotteransteuerung (HP 7475A)
NJSYMBOL	INC	: Include-Datei für nj-Symbole berechnen
RS232	BAT	: Batch-Datei für Anpassung COM1:
HFIXT	PAS	: Source für Grafik- & Textseite Restoration
HFIXT	COM	: Grafik- & Textseite restaurieren
HFIX	COM	: Grafikseite restaurieren (HERCULES-Programm)

HARDCOPY COM : Druckertreiber  
ERROR MSG : Fehlermeldungen (Turbo-Pascal)  
????????? FON : Schriftarten (Fonts) für Turbo-Pascal