

明 細 書

発明の名称：分析装置

技術分野

[0001] 本発明は、サンプルをイオン化して分析する分析装置に関するものである。

背景技術

[0002] 国際公開WO 2 0 0 8 / 1 2 9 9 2 9号には、試料ガスをイオン化するイオン化部と、前記イオン化部からの距離が互いに異なるように、前記イオン化部を挟んで設けられ、前記イオン化部からのイオンを検出する第1イオン検出部及び第2イオン検出部と、前記イオン化部及び前記第1イオン検出部の間に設けられ、前記イオン化部からのイオンを選択的に通過させるフィルタ部と、前記第1イオン検出部により得られる試料ガスの第1の全圧、及び前記第2イオン検出部により得られる試料ガスの第2の全圧を用いて、前記第1イオン検出部により得られる前記フィルタ極部により選択された特定成分の分圧を補正する演算装置と、を備え、四重極質量分析法等を用いたガス分析計において、分解能を維持しながら、測定値が雰囲気圧力の変化に追従しなくなった領域においても補正可能にすることが記載されている。

[0003] 国際公開WO 2 0 0 7 / 0 8 3 4 0 3号には、四重極型質量分析装置において、選択可能な複数の走査速度に適切な直流バイアス電圧を対応付けたテーブルを予め自動調整データ記憶部に記憶させておくことが記載されている。自動調整時には制御部はテーブルを参照して各走査速度に対応した直流バイアス電圧を求め、イオン引き込み用電圧発生部の出力をこれに固定し、それ以外の例えばイオン光学系への印加電圧等を変化させながら検出信号が最大となるような電圧条件を見出す。そして、走査速度毎に最適条件を見つけて自動調整結果データに記録する。目的試料の分析時には、オペレータが指定した走査速度に応じた直流バイアス電圧をテーブルから求め、自動調整結果データから最適条件を求め、それらに基づいてスキャン測定条件を決める

。これにより、スキャン測定の走査速度を大きくした場合における検出感度の低下を抑えることができる。

発明の概要

[0004] 質量分析装置の自動調整においては、検出信号が最大となるような電圧条件が見出される。高濃度の成分の検出信号が飽和しないためである。したがって、低濃度の成分の検出信号は小さく、精度は低下しやすい。

[0005] 本発明の一態様は、分析対象の分子をイオン化するイオン化ユニットと、イオン化ユニットにより生成されたイオンを選択的に通過させるフィルタユニットと、フィルタユニットを通過したイオンを検出する検出ユニットとを有する分析装置である。検出ユニットは、マトリクス状に配置された複数の検出エレメントを含む。分析装置は、さらに、複数の検出エレメントの中で、検出を有効にする検出エレメントを含む検出パターンを切り替える第1の再構成ユニットを有する。検出ユニットの典型的なものはイオン電流を測定する検出ユニットであり、検出エレメントの典型的なものはファラデーカップである。検出エレメントは、二次電子倍增タイプ、CCDタイプなどであってもよい。複数の検出エレメントは2次元に配置されてもよく、3次元に配置されていてもよい。

[0006] 複数の検出エレメントから構成される検出パターンを再構成することにより、イオン量により検出ユニットの感度を変えたり、検出ユニットに到達するイオンの種類は、到達経路、到達条件に適したパターンを選択できる。したがって、高濃度の成分を精度よく測定できるとともに、低濃度の成分も精度よく測定できる分析装置を提供できる。

[0007] イオン化ユニットは、複数のイオン源を含み、分析装置は、複数のイオン源のそれぞれのイオン源の特性変化を推定または測定するモニターと、イオン化ユニットを再構成する第2の再構成ユニットとを含んでいてもよい。第2の再構成ユニットは、モニターにより得られる各イオン源の特性変化に基づいて複数のイオン源の中でアクティブにするイオン源の選択、アクティブにする複数のイオン源の接続およびアクティブにするイオン源への供給電力

の少なくともいずれかを再構成する。

[0008] イオン化ユニットは、出力電圧および電流が安定していることが望ましい。しかしながら、経年劣化、寿命などによる特性変化があることは避けられない。第2の再構成ユニットにより、イオン源の経年劣化あるいは寿命により特性に変化があっても、アクティブにするイオン源を切り替えたり、複数のイオン源を並列に接続したり、直列および並列に接続することにより、イオン化ユニットとしての特性変化を長時間にわたり一定の範囲に収めるように制御することができる。また、第2の再構成ユニットにより、アクティブにするイオン源への供給電力を長寿命が期待できる範囲になるように、複数、特に3つ以上のイオン源を使いまわしたり、接続を変えたりすることができる。

[0009] 複数のイオン源のそれぞれは、電子を放出するエミッターと、エミッターとの間に電位差を設けるグリッドとを含むものであってもよい。エミッターはフィラメント、ディスクカソードを含む。第2の再構成ユニットは、エミッターおよび前記グリッドの接続を独立して再構成するユニットを含んでもよい。通常、例えば、フィラメントと、グリッドとはバイアス電圧を付与するために一对で使用される。グリッドをフィラメントと単独に接続できるようにすることにより、グリッドをイオン化ユニット内の電場調整用の電極として利用し、イオン化ユニット内の電子の分布やイオン化された分子の流通を改善することが可能となる。また、グリッドをシールドとして機能させて、不活性状態のエミッターへの不純物の付着を防止でき、フィラメントなどのエミッターの劣化を抑制できる。

[0010] モニターは、イオン源に供給される電力、イオン源の温度などをモニターするものであってもよく、検出ユニットにおけるチューニング用ガスの検出強度を取得するユニットを含んでいてもよい。濃度が判明している成分の検出強度の変化によりイオン源の特性の変動を判断できる。

[0011] 第1の再構成ユニットは、第2の再構成ユニットがイオン化ユニットを制御するタイミングで検出パターンを選択または切り替えるユニットを含んで

もよい。イオン化ユニットの再構成によりイオン電流が変化した場合に、検出ユニットの検出パターンを選択または切り替えることにより、測定条件の出ユニットの検出パターンを選択または切り替えることが可能となる。たとえば、イオン電流が変動する場合、イオン電流が大いときは検出面積の小さなパターンを選択し、イオン電流が小さいときは検出面積の大きなパターンを選択することにより、測定結果が飽和したり、測定結果が雑音に埋もれてしまうような事態を未然に防止できる。

[0012] 第1の再構成ユニットは、フイルタユニットのイオンを選択する条件に連動して検出パターンを選択または切り替えるユニットを含んでもよい。成分(分子、化学物質、組成)毎に濃度がある程度予測できる分析の場合は、予測される濃度の測定に適した検出パターンを採用することにより精度の高い測定が可能となる。フイルタユニットの一例は四重極型であるが、扇型磁場型、電場磁場二重収束型、飛行時間型などのイオン透過型のフイルタであってもよく、ウイーンフイルタであってもよく、FAIMSなどの非真空タイプ of フイルタまたはそれらを組み合わせたものであってもよい。

[0013] 本発明の他の態様の1つは、分析装置の制御方法であり、以下のステップを含む。

- ・チューニング用のガス中の標準的な濃度のイオンを、第1の再構成ユニットがセットする中程度の面積の検出パターンで検出するように、第2の再構成ユニットがイオン化ユニットをセットすること。

[0014] 検出ユニットをミドルレンジにセットすることにより、高濃度の成分および低濃度の成分に対して面積の異なる検出パターンを適用することができ、高精度で測定でき濃度範囲を拡張できる。

[0015] 制御方法は以下のステップを含んでもよい。

- ・第2の再構成ユニットがイオン化ユニットを再構成したときに、第1の再構成ユニットがイオン化ユニットの再構成によるイオン化強度を補償するように検出パターンを切り替えること。イオン化ユニットの再構成によりイオン化能力の変動を検出ユニット側で検出パターンを切り替えることにより補

償できる。

[0016] 制御方法は、さらに、以下のステップを含んでもよい。

・第1の再構成ユニットがフィルタユニットのイオンを選択する条件に連動して検出パターンを選択または切り替えて、イオンを検出すること。高濃度の成分および低濃度の成分に対して面積の異なる検出パターンを適用することができ、高精度で測定でき濃度範囲を拡張できる。

[0017] 本発明の他の態様の1つは、上記のステップを含むプログラム（プログラム製品）であり、適当な記録媒体に記録して提供できる。

図面の簡単な説明

[0018] [図1]分析装置の概要を示す図。

[図2]異なる分析装置の概要を示す図。

[図3]イオン源の経時変化を示す図。

[図4]検出ユニットを再構成する図。

[図5]自動チューニングの処理を示すフローチャート。

[図6]検出パターンの他の例。

発明を実施する形態

[0019] 図1にガス分析装置の一例を示している。この分析装置1は四重極型質量分析装置であり、サンプリングされたガス9をイオン化するイオン化ユニット10と、イオン化された分子（イオン）を選択的に通過される四重極型のフィルタユニット20と、イオン化ユニット10からイオンをフィルタユニット20へ導くフォーカスユニット（イオン引出電極）30と、フィルタユニット20でフィルタリングされたイオンを検出する検出ユニット50と、制御ユニット60とを含む。分析装置1は真空容器5を含み、真空容器5にイオン化ユニット10、フィルタユニット20、フォーカスユニット30および検出ユニット50が収納されている。

[0020] イオン化ユニット10は、4つのイオン源11a～11dを含む。それぞれのイオン源11a～11dは、熱電子を放出するフィラメント12と、グリッド（グリッド電極）13と、リペラ（リペラ電極）14とを含む。イオ

ン化ユニット 10 は全圧測定を兼ねたコレクタ（コレクタ電極） 15 を含む。フィラメント 12 は容器 5 に対してプラスあるいはマイナスにバイアスされたフィラメント電圧 V_f が供給され、フィラメント電流 I_f が供給されることにより熱電子を出力する。グリッド 13 にはフィラメント電圧 V_f に対してプラスの電位差（バイアス） V_e を生ずるグリッド電圧 V_g が供給され、熱電子が所定のイオン化エネルギーを得るように加速する。リペラ 14 にはフィラメント電圧 V_f と同電圧が供給され、熱電子をグリッド方向に集中させる。熱電子を放出するエミッターは、フィラメント 12 であってもよく、ディスクカソードであってもよい。

[0021] 制御ユニット 60 は、回路基板、CPU、メモリなどの資源を用いて構成される。制御ユニット 60 は、イオン源 11a ~ 11d を制御するイオン化装置制御ユニット（イオナイザ制御ユニット） 61 と、フォーカスユニット 30 および四重極型フィルタ 20 を制御するフィルタ制御ユニット 70 と、検出ユニット 50 を制御する検出器制御ユニット（ディテクタ制御ユニット） 80 と、これらの制御ユニットを協調制御する中央制御ユニット 90 とを含む。

[0022] 中央制御ユニット（システムコントローラ） 90 は、イオナイザ制御ユニット 61 を介してイオン化ユニット 10 をフィードバック制御する PID ユニット 91 と、ディテクタ制御ユニット 80 を介して検出ユニット 50 を制御し、検出ユニット 50 により得られるイオン電流を評価するアナライザー 92 と、チューニング用のガス（キャリブレーション用ガス） 8 を用いて自動的分析装置 1 の測定条件を調整するチューニングユニット（自動チューニングユニット） 95 と、主にフィルタ 20 の磁場調整を行うキャリブレーションユニット 96 とを含む。

[0023] 以下で説明するようにイオナイザ制御ユニット 61 はイオン化ユニット 10 を再構成する機能を含み、ディテクタ制御ユニット 80 は検出ユニット 50 を再構成する機能を含む。したがって、分析装置 1 は、プログラマブルなイオン化ユニット 10 と、プログラマブルな検出ユニット 50 とを含み、測定

対象のガス 9 および使用状態などによりイオン化ユニット 10 を最適化し、それに対応して検出ユニット 50 を最適化してガス 9 に含まれる成分（分子、化学物質、組成）を分析する。検出ユニット 50 の分析結果、すなわちアナライザー 92 の出力をイオン化ユニット 10 のモニターとして使用することができ、イオン化ユニット 10 をさらに最適化することが可能である。このように、制御ユニット 60 は、イオン化ユニット 10 および検出ユニット 50 をクローズドループ型で制御する機能を含む。

[0024] イオナイザ制御ユニット 61 は、複数のイオン源 11、具体的にはイオン源 11a～11d の電氣的な接続を切り替える接続回路 62 と、接続回路 62 を介して各イオン源 11a～11d の特性値の変動、たとえば、抵抗値の変動、消費電力の変動を測定または推定するモニター 63 と、接続回路 62 を介してイオン源 11a～11d に電力を供給する電力供給ユニット 64 と、モニター 63 の測定結果に基づいて各イオン源 11a～11d の選択または接続を制御する駆動制御ユニット（イオンドライブユニット）65 とを含む。駆動制御ユニット 65 は、イオン化ユニット 10 の構成を切り替える再構成ユニット（第 2 の再構成ユニット）としての機能を含み、プログラマブルなイオン化ユニット 10 を実現する。

[0025] 駆動制御ユニット 65 は、イオン源 11a～11d の接続を再構成する機能を含み、イオン源 11a～11d の特性変動に基づいて、イオン源 11a～11d の 1 つを選択して電力を供給することによりアクティブにしたり、いくつかのイオン源を並列に接続して使用（アクティブに）したり、いくつかのイオン源を直列に接続して使用したり、いくつかのイオン源を直列および並列に接続して使用する。駆動制御ユニット 65 は、さらに、アクティブにされているイオン源 11a～11d への供給電力を制御し、エミッター（フィラメント）12 の温度を制御（再構成）する機能を含む。

[0026] 図 2 に、イオン化ユニット 10 の異なる例を示している。このイオン化ユニット 10 では、八角形の断面を備えたハウジング（真空容器）5 に 5 つのイオン源 11a～11e が配置されており、イオナイザ制御ユニット 61 に

より接続および温度が制御（再構成）される。したがって、このイオン化ユニット 10 もプログラマブルであり、5つのイオン源 11a～11eを個別でも組み合わせでも使用できる。

[0027] 図3に、イオン源の一般的な特性を示している。イオン源 11は使用時間（ライフタイム）によりフィラメント 12の抵抗が増加し、イオン化電流が低下する。したがって、所定のイオン化電流を確保しようとするフィラメント電圧 V_f を上げる必要がある。ハウジング 5に対するバイアス電圧を変えたり、所定のイオン化電圧 V_e を確保するためにはフィラメント電圧 V_f の変動にともないグリッド電圧 V_g を変える必要があり、それに伴ってさらにフォーカスユニット 30の条件を変えたりする必要があり、フィルタユニット 20の設定条件にも影響が及ぶ可能性がある。したがって、個々のイオン源で電圧を制御してイオン化電流を一定に保つことができる範囲は限られている。一方、イオン化電流が一定に保たれないと、全圧が変わり、検出ユニット 50の感度も変動する。

[0028] イオン化電圧 V_e は、キャリアガス成分に対して不感応にするためにイオン化電圧を限定することがあり、イオン化電流を確保するために電圧を制御することが難しいケースも多い。たとえば、ヘリウムのイオン化エネルギーは 24.58 eV であり、ヘリウムをキャリアガスとする場合は、イオン化電圧を 24 V 以下に限定することが望ましい。また、質量分析において多くのデータが得られているイオン化エネルギーは 70 eV であり、イオン化電圧を 70 V に制御することが多い。さらに、モバイルの機器に採用される場合は、電源電圧が限られたり、消費電流が限られるため、イオン化電圧を制限したいケースもある。したがって、イオン化電圧を一定に保ちながら、経時変化等に応じてイオン化電流を所定の範囲に保持することは重要である。

[0029] イオナイザ制御ユニット 61の駆動制御ユニット 65は、イオン源 11の電流特性、使用時間をモニターし、使用時間、稼働温度などの稼働条件によりイオン源 11のエミッターであるフィラメント 12の電流特性（抵抗値）が所定の範囲を超えて劣化したとき、あるいは劣化が想定されるときに、異

なるイオン源に自動的に切り替える機能を含む。

[0030] 駆動制御ユニット65は、さらに、全てのイオン源11の電流特性が所定の範囲を下回り、抵抗値が所定の値（閾値）を上回る、あるいは以上になったと判断すると、複数のイオン源を組み合わせることにより、イオン化ユニット10の内部特性にできる限り影響を与えない範囲でイオン化電流が所定の範囲になるようにイオン源11の接続を制御する機能を含む。典型的には2またはそれ以上のイオン源のフィラメント12を並列に接続して使用する。電圧の調整のために複数のイオン源のフィラメント12を直列に接続して使用することも可能であり、並列および直列に接続して使用することも可能である。

[0031] 駆動制御ユニット65が複数のイオン源11のエミッター12の接続を再構成することにより、エミッター12の個々の性能としては十分な能力が得られない（寿命により限界に達した）場合でも、複数のエミッター12を並列に接続して複数のイオン源11をアクティブにすることによりイオン化ユニット10としての性能を確保できる。能力が十分な複数のイオン源11をアクティブにすることにより、イオン化ユニット10のイオン化性能を高いレベルに維持し、微量成分の測定に適したイオン化条件に設定することも可能である。また、複数のイオン源11をアクティブにすることにより、フィラメント電流を意図的に小さくした状態でイオン化ユニット10を稼働させて、イオン源11の寿命を延長させることも可能である。

[0032] 駆動制御ユニット65は、さらに、各イオン源11a～11dのフィラメント12とグリッド13とに対し個別に特定の電圧を付与する機能を含む。たとえば、非稼働中のイオン源11のグリッド13にリペラ14と同電圧を付与することにより非稼働中のフィラメント12がガス成分で汚染されることを抑制する。また、非稼働中のイオン源11のグリッド13に稼働中のイオン源11のグリッド13と同電位あるいはそれに近い電位を与えることによりイオン化ユニット10の内部の熱電子の分布を制御することが可能である。

- [0033] 図4に、検出ユニット50およびディテクタ制御ユニット80を抜き出して示している。ディテクタ制御ユニット80は検出ユニット50の検出パターンを再構成することにより検出ユニット50の感度を調整する。検出ユニット50は、フィルタユニット20を通過したイオンが接触してイオン電流が流れることによりイオンを検出する複数のイオンコレクタエレメント（検出エレメント）51を含む。イオンコレクタエレメント51は典型的にはファラデーカップである。エレメント51は、二次電子倍增管（エレクトロンマルチプライア）、CCDなどであってもよい。
- [0034] この検出ユニット50においては、144個のエレメント51が、2次元に、縦12個、横12個のマトリクスをなすように配置されている。エレメント51の配置は、縦横同数のマトリクス状であってもよく、縦横の数が異なるマトリクス状であってもよく、2次元の平面上の配置であってもよく、フィルタ20の端から等距離をなすような3次元の面に沿った配置であってもよい。また、検出ユニット50を構成するエレメント51の数は、144個に限らず、さらに多くても、あるいは少なくともよい。
- [0035] ディテクタ制御ユニット80は、複数の検出エレメント51の中で、検出を有効にする検出エレメント51をアクティブにする再構成ユニット（第1の再構成ユニット、コンフィグレーションドライバ）83を含む。再構成ユニット83は、チューニングデータベース89に含まれるコンフィグレーションバッファ87に格納されている複数の検出パターン88、たとえば、パターン88A、88B、88Cのいずれかを選択し、検出ユニット50でアクティブにするエレメント51のパターン88を切り替える。したがって、再構成ユニット83は、検出面積（検出感度）と、2次元または3次元の空間的な検出感度（検出位置）が可変なプログラマブルな検出ユニット50を提供する。
- [0036] ディテクタ制御ユニット80は、さらに、パターン88にしたがってアクティブにされたエレメント51の検出結果（イオン電流）を定期的にサンプリングするサンプリングユニット81と、サンプリングされた全エレメント

の値をデジタル化するアナログデジタルコンバータ (ADC) 82とを含む。サンプリングユニット 81は、144個の全エレメント 51の検出結果をサンプリングし、全エレメント 51の中からコンブリグレーションにより選択されたパターン 88に含まれるエレメント 51の検出値を集積して検出結果 (イオン電流) として出力してもよい。ADC 82によりデジタル化された検出結果はシステムコントローラ 90のアナライザ 92に出力される。検出結果は、システムコントローラ 90を介して、またはADC 82から直にデータを集計する外部のサーバーなどに有線または無線により出力してもよい。

[0037] 再構成ユニット 83は、たとえば、イオナイザ制御ユニット 61が新しい

イオン源 11に切り替えたことを情報として取得すると、まず、最も面積の小さいパターン 88A (5×5) を選択し、所定の時間が経過すると、次に面積の大きなパターン 88B (7×7) を選択し、さらに時間が経過すると面積のさらに大きなパターン 88C (12×12) を選択して、これらのパターンに含まれるエレメント 51の集積値が検出結果 (イオン電流) として出力されるようにする。パターン 88を切り替えるタイミングは時間の代わり、あるいは時間とともに、イオン源 11の特性値をモニタリングした結果や、各パターン 88で得られるイオン電流の値に基づいて判断してもよい。

[0038] また、再構成ユニット 83は、チューニングユニット 95が実施する自動チューニングの結果に基づいてパターン 88を切り替えてもよい。自動チューニングは、定期的に、分析装置 1の各種パラメータをモニタリングして、結果として、また、外部からの指示または要因により行われてもよい。また、コンブリグレーションを行う際は自動的にチューニングも行われる。

[0039] チューニングにおいては、測定ガス 9の代わりに、定期的に成分および濃度の判明したキャリアブレンド用のガス (チューニング用のガス) 8を分析装置 1で計測し、イオン化ユニット 10の特性と、検出ユニット 50の特性とを判断し、イオン化ユニット 10の各種パラメータをチューニングする。

。チューニングには、ガスフローを最適化したり、フィルタユニット 20 のコンディションを最適化したりすることが含まれ、イオン化ユニット 10 と検出ユニット 50 とをそれぞれ再構成することを含んでもよい。

[0040] 図 5 に、自動チューニングの処理の概要をフローチャートにより示している。なお、フローチャートには記載されていないが、チューニング中、チューニング用のガス 8 の測定は随時行われる。ステップ 101 において自動チューニングが実施されるタイミングと判断されると、まず、チューニングユニット 95 は、ステップ 102 において、イオン化ユニット 10 の構成を最適化する。チューニングユニット 95 は、選択されているイオン源 11 の稼働時間からイオン源 11 の特性変化、残存のライフタイムなどをデータベース 89 に予め蓄積されたイオン源 11 の特性情報から予想できる。チューニングユニット 95 は、稼働中のモニター 63 の監視結果からもイオン源 11 の特性変化を得ることができる。チューニングユニット 95 は、成分および濃度の判明しているチューニング用のガス 8 の測定結果から、選択されているイオン源 11 の特性変化を検証することも可能である。

[0041] チューニングユニット 95 は、イオン源 11 の特性変化に基づいて、イオン化ユニット 10 の構成、すなわち、複数のイオン源の選択、接続、イオン化電流などの稼働条件を、イオン化性能を所定の範囲に維持すること、イオン源 11 のライフタイムをできる限り延長することなどを目的として最適な構成に変更する。チューニングユニット 95 は、イオナイザ制御ユニット 61 の駆動制御ユニット 65 を介してイオン化ユニット 10 を再構成する。

[0042] ステップ 103 において、最適化されたイオン化ユニット 10 により所望の感度（測定感度）が得られるとチューニングユニット 95 が判断したり、チューニング用ガス 8 の測定結果が良好であればチューニングを終了してステップ 107 において測定を再開する。

[0043] ステップ 103 において所望の感度が得られないと判断されると、ステップ 104 において、検出ユニット 50 を再構成したり、検出ユニット 50 の測定中に再構成するプログラムの変更を行う。検出ユニット 50 の検出感度

を変えることにより、イオン化ユニット 10 の再構成ではカバーできない範囲についてもリニアな測定結果を得ることができる。たとえば、イオン化ユニット 10 を再構成することにより、イオン源 11 のライフタイムによりイオン化電流の変動を $\pm 20\%$ 程度の範囲に収められる場合、チューニングユニット 95 は、そのイオン化電流の変化によるイオン化強度の変動を補償するパターン 88 を選択して検出ユニット 50 を再構成する。イオン化ユニット 10 および検出ユニット 50 をチューニングにより随時最適化することにより、全体として、リニアな検出結果を長時間にわたり出力する分析装置 1 を提供できる。このため、ロングライフで、測定精度の高い分析装置（測定装置）1 を提供できる。

[0044] ステップ 104 において検出ユニット 50 の再構成プログラムをチューニングする場合は、チューニングユニット 95 は、まず、チューニング用のガス 8 に含まれる標準的な濃度のイオン（分子、成分）を、ディテクタ制御ユニット 80 の再構成ユニット 83 がセットする中程度の面積の検出パターン 88 で検出するように、駆動制御ユニット（イオンドライバ）65 を用いてイオン化ユニット 10 をセットする。さらに、チューニングユニット 95 は、フィルタユニット 20 がイオンを選択する条件に連動して、濃度の高いイオンが選択されるときは面積の小さな検出パターン 88 が選択され、濃度の低いイオンが選択されるときは面積の大きな検出パターン 88 が選択されるように再構成ユニット 83 のプログラミングを行い、面積がそれぞれ異なる検出パターン 88 で検出対象のイオンが適切な感度で検出できるか否かを検証する。検出パターン 88 を再構成するプログラム 86 は、チューニングデータベース 89 に格納しておくことができる。

[0045] チューニング用ガス 8 は、一般的に測定対象のガス 9 に含まれていると予想される成分を予想される濃度で含むものであり、チューニング用ガス 8 により各成分（イオン）の検出パターン 88 を予めプログラミングすることによりサンプルガス 9 の測定感度の濃度の依存性を低減できる。すなわち、プログラマブルな検出ユニット 50 においては、濃度の高い成分は相対的に低

い感度で測定でき、濃度の低い成分は相対的に高い感度で測定できるので、各成分の測定精度のばらつきを抑えることができる。

[0046] ステップ105において、チューニング用ガス8の各成分が適当な感度で測定できるとチューニングユニット95が判断したり、チューニング用ガス8の各成分の測定結果が良好であればチューニングを終了してステップ107において、チューニングにより得られたプログラム86を用いて測定を再開する。

[0047] チューニングガス8の各成分の濃度変動に対し、イオン化ユニット10の条件を固定した状態では、検出パターン88を切り替えて調整できる検出ユニット50の測定範囲（ターンダウンレシオ）で十分に追従できない可能性がある。ステップ105において検出ユニット50の感度調整が検出ユニット50のプログラミングだけでは対応できないと判断されると、ステップ106において、チューニングユニット95は、さらに、検出ユニット50の再構成と協調してイオン化ユニット10の再構成を行う協調制御を設定する。協調制御においては、チューニングユニット95は、検出ユニット50の再構成とイオン化ユニット10の再構成とを協調制御するプログラム（イオナイザ・ディテクタ協調制御プログラム）85を生成する。

[0048] ステップ106において、協調制御プログラム85が生成され、確認されると、チューニングを終了してステップ107において、チューニングにより得られたプログラム85を用いて測定を再開する。協調制御プログラム85においては、ディテクタ制御ユニット80の再構成ユニット（第1の再構成ユニット）83がフィルタユニット20のイオンを選択する条件に連動して検出パターン88を選択または切り替えて検出ユニット50をダイナミックに再構成する。それとともに、イオナイザ制御ユニット61の駆動制御ユニット（第2の再構成ユニット）65も、フィルタユニット20のイオンを選択する条件に連動してイオン化ユニット10の接続あるいは駆動電流を制御してイオン化ユニット10をダイナミックに再構成する。

[0049] オートチューニングの一連の処理は、分析装置1のメモリ99に内蔵され

るファームウェア 98 として提供することが可能である。また、分析装置 1 を制御するホスト、例えば、パーソナルコンピュータで稼働するプログラム（プログラム製品）として提供することも可能であり、分析装置 1 がネットワークに接続されていれば、ネットワーク経由で分析装置 1 を制御するプログラムとして提供することも可能である。

[0050] チューニングプログラム 98 は、フィルタユニット 20 の磁場の調整を含めたキャリブレーションプログラム 97 と共に実行してもよく、定期的に行ってもよく、検出ユニット 50 の測定結果の時間的な変動が所定の範囲を超えたときに自動的に実行するようにしてもよい。また、イオン源 11 のライフタイムに関連する適当な運転時間が経過したときに、イオン電流値などを変えて性能の劣化を検証したり、分析装置 1 の性能をシミュレーションするためにキャリブレーションプログラム 97 を実行してもよい。

[0051] 図 6 に、その他の検出ユニット 50 で選択可能な検出パターンのいくつかの例を示している。図 6 において斜線を引いたエレメント 51 がアクティブにされるエレメント 51 である。感度の低い成分に対しては、パターン 88 D のような中央に集中したパターンが望ましいことがあり、平均的に強度を調整するには、パターン 88 E のようなメッシュのパターンが望ましいことがある。また、感度が高すぎる成分に対しては、パターン 88 F のように感度の低い領域の結果を集積した方が、精度が向上することがある。パターン 88 G のように適当に間引いたパターンが有効なケースもある。検出ユニット 50 にプログラム可能な検出パターン 88 はこれらに限定されない。

[0052] 検出パターン 88 は、イオン化ユニット 10 のチューニングの補正（補償）に限定されず、測定結果（検出ユニット 50 の出力）のチューニングに用いることも可能である。たとえば、フィルタユニット 20 において特定の分子または原子を測定した結果、感度が高すぎて結果が飽和してしまう場合は、より面積の小さなパターンを採用することにより測定値を測定範囲内に調整することができる。また、その逆も可能である。また、ファラデーカップなどの検出エレメント 51 も経時変化により検出感度が劣化することがある

。したがって、使用時間によりアクティブにするエレメント 51 の位置を変えたり、面積を自動的に変えて、検出ユニット 50 の感度の線形性を長期間にわたり維持するようにすることも可能である。

[0053] 各成分（イオン）の測定に適したパターン 88 は、シミュレーションや実験等によりフィルタユニット 20 のタイプ（四重極型、F A I M S 型、ウィーンフィルタなど）とイオン化される分子あるいは原子（化学物質）との組み合わせを特定して事前に求めてもよい。また、サンプリングの条件、イオン化ユニット 10 の条件、さらにフィルタユニット 20 の条件が一定または安定した状態で、パターン 88 を特定のアルゴリズムで、またはランダムに変更して、それらの条件および化学物質の測定に最適なパターンを自動的に選択するようにしてもよい。また、測定対象のガス 9 に含まれる成分（測定対象の化学物質）の測定に適して決定されたパターン 88 を、測定対象の化学物質を特定するための 1 つの要素として使用することも可能である。また、成分および濃度が特定されたキャリブレーション用のガス 8 の測定に適した標準パターン 88 と、測定時に決定されたパターン 88 とを比較し、分析装置 1 の特性を判断したり、経時変化の状況を判断したりすることも可能である。

[0054] プログラマブルなイオン化ユニット 10 および検出ユニット 50 を備えた分析装置 1 は携帯型の機器に搭載される分析機器としても優れている。ウェアラブルやモバイルといったバッテリー駆動される機器に分析装置 1 が搭載される場合、バッテリーの容量は充電状態などの利用環境に依存して、搭載された分析装置 1 が消費できる電力や電圧が限定されていたり、変動したりする場合がある。たとえば、搭載された分析装置 1 が測定したガス 9 の成分や濃度に変動がない場合は、感度の低いパターン 88 を選択して測定を継続し、モニタリングの際の消費電力を低減できる。モニタリング中に、何らかの要因あるいはイベントによりガス 9 の成分や濃度に変動が見られたとき、または、予測されたときに一時的に感度の高いパターン 88 を選択して、消費電力が高くても測定感度の高い状態に分析装置 1 を再構成できる。

- [0055] このように、分析装置 1 は、全体の測定感度をフレキシブルに変えることが可能である。たとえば、危険物質を感知したり、危険物質が存在する可能性があるときに感度の高い状態を選択することにより、より低濃度で、早いタイミングで危険の有無を判断することができる。
- [0056] また、分析装置 1 においては、検出ユニット 50 の全エレメント 51 の情報を、そのときに解析あるいは分析に用いられるパターン 88 とは別に、常に、自己のメモリや、適当な通信手段で接続されたサーバー、またはクラウド上に格納しておくことも可能である。イベントレコーダのように、通常は限られたパターン 88 の測定結果を見ながら状況を判断し、事後に、クラウド上などに格納された全データを解析してさらに詳細な解析を行うことも可能である。
- [0057] 上記において説明した分析装置は本発明の一例であり、分析装置は、分析機能を含む携帯端末であってもよく、プラント等を制御する制御機器であっても分析機能を含む機器であってもよく、分析機能を含む車両などの移動手段であってもよい。また、本明細書に記載以外の点においても、本発明の趣旨の範囲内で適宜、変更、追加、修正を行うことは可能であり、それらの機器も本願の請求の範囲に包含されることは明らかである。

請求の範囲

- [請求項1] 分析対象の分子をイオン化するイオン化ユニットと、
 前記イオン化ユニットにより生成されたイオンを選択的に通過させるフィルタユニットと、
 前記フィルタユニットを通過したイオンを検出する検出ユニットとを有し、
 前記検出ユニットは、マトリクス状に配置された複数の検出エレメントを含み、さらに、
 前記複数の検出エレメントの中で、検出を有効にする検出エレメントを含む検出パターンを切り替える第1の再構成ユニットを有する、
 分析装置。
- [請求項2] 請求項1において、
 前記イオン化ユニットは、複数のイオン源を含み、
 さらに、
 前記複数のイオン源のそれぞれのイオン源の特性変化を推定または測定するモニターと、
 前記特性変化に基づいて前記複数のイオン源の中でアクティブにするイオン源の選択、アクティブにする複数のイオン源の接続およびアクティブにするイオン源への供給電力の少なくともいずれかを再構成する第2の再構成ユニットとを有する、分析装置。
- [請求項3] 請求項2において、
 前記複数のイオン源のそれぞれは、電子を放出するエミッターと、
 前記エミッターとの間に電位差を設けるグリッドとを含み、前記第2の再構成ユニットは、前記エミッターおよび前記グリッドの接続を独立して再構成するユニットを含む、分析装置。
- [請求項4] 請求項2または3において、前記イオン化ユニットは、少なくとも3つのイオン源を含む、分析装置。
- [請求項5] 請求項2ないし4のいずれかにおいて、前記モニターは、前記検出

ユニットにおけるチューニング用ガスの検出強度を取得するユニットを含む、分析装置。

[請求項6] 請求項2ないし5のいずれかにおいて、前記第1の再構成ユニットは、前記第2の再構成ユニットが前記イオン化ユニットを制御するタイミングで検出パターンを選択または切り替えるユニットを含む、分析装置。

[請求項7] 請求項1ないし6のいずれかにおいて、前記第1の再構成ユニットは、前記フィルタユニットのイオンを選択する条件に連動して検出パターンを選択または切り替えるユニットを含む、分析装置。

[請求項8] 請求項1ないし7のいずれかにおいて、前記複数の検出エレメントは2次元に配置されている、分析装置。

[請求項9] 分析装置の制御方法であって、
前記分析装置は、
分析対象の分子をイオン化するイオン化ユニットと、
前記イオン化ユニットにより生成されたイオンを選択的に通過させるフィルタユニットと、
前記フィルタユニットを通過したイオンを検出する検出ユニットとを有し、
前記検出ユニットは、マトリクス状に配置された複数の検出エレメントを含み、
前記イオン化ユニットは、複数のイオン源を含み、さらに、
前記複数の検出エレメントの中で、検出を有効にする検出エレメントを含む検出パターンを切り替える第1の再構成ユニットと、
前記複数のイオン源の特性変化に基づいて前記複数のイオン源の中でアクティブにするイオン源の選択、アクティブにする複数のイオン源の接続およびアクティブにするイオン源への供給電力の少なくともいずれかを再構成する第2の再構成ユニットとを有し、
当該制御方法は、

チューニング用のガス中の標準的な濃度のイオンを、前記第1の再構成ユニットがセットする中程度の面積の検出パターンで検出するように、前記第2の再構成ユニットが前記イオン化ユニットをセットすることを有する、制御方法。

[請求項10] 請求項9において、前記第2の再構成ユニットが前記イオン化ユニットを再構成したときに、前記第1の再構成ユニットが前記イオン化ユニットの再構成によるイオン化強度を補償するように検出パターンを切り替えることを有する、制御方法。

[請求項11] 請求項9または10において、前記第1の再構成ユニットが前記フィルタユニットのイオンを選択する条件に連動して検出パターンを選択または切り替えて、イオンを検出することを有する、制御方法。

[請求項12] 分析装置の制御プログラムであって、
前記分析装置は、
分析対象の分子をイオン化するイオン化ユニットと、
前記イオン化ユニットにより生成されたイオンを選択的に通過させるフィルタユニットと、
前記フィルタユニットを通過したイオンを検出する検出ユニットとを有し、
前記検出ユニットは、マトリクス状に配置された複数の検出エレメントを含み、
前記イオン化ユニットは、複数のイオン源を含み、さらに、
前記複数の検出エレメントの中で、検出を有効にする検出エレメントを含む検出パターンを切り替える第1の再構成ユニットと、
前記複数のイオン源の特性変化に基づいて前記複数のイオン源の中でアクティブにするイオン源の選択、アクティブにする複数のイオン源の接続およびアクティブにするイオン源への供給電力の少なくともいずれかを再構成する第2の再構成ユニットとを有し、
当該プログラムは、

チューニング用のガス中の標準的な濃度のイオンを、前記第1の再構成ユニットがセットする中程度の面積の検出パターンで検出するように、前記第2の再構成ユニットが前記イオン化ユニットをセットすることを有する、プログラム。