

(19) 日本国特許庁 (JP)

(12) 特 許 公 報 (B2)

(11) 特許番号

特許第6550468号
(P6550468)

(45) 発行日 令和1年7月24日 (2019.7.24)

(24) 登録日 令和1年7月5日 (2019.7.5)

(51) Int. Cl.

F I

H O 1 J 49/14 (2006.01)

H O 1 J 49/14

G O 1 N 27/62 (2006.01)

G O 1 N 27/62

G

G O 1 N 27/62

E

請求項の数 19 (全 11 頁)

(21) 出願番号 特願2017-552078 (P2017-552078)
 (86) (22) 出願日 平成28年3月29日 (2016.3.29)
 (65) 公表番号 特表2018-514909 (P2018-514909A)
 (43) 公表日 平成30年6月7日 (2018.6.7)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2016/024757
 (87) 国際公開番号 W02016/160835
 (87) 国際公開日 平成28年10月6日 (2016.10.6)
 審査請求日 平成31年3月28日 (2019.3.28)
 (31) 優先権主張番号 62/139,758
 (32) 優先日 平成27年3月29日 (2015.3.29)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

早期審査対象出願

(73) 特許権者 517341331
 メリディオン エルエルシー
 MERIDION, LLC
 アメリカ合衆国 マサチューセッツ州 O
 2144 サマービル アッシュランド
 ストリート 15 アpartment 1
 (74) 代理人 100147485
 弁理士 杉村 憲司
 (74) 代理人 230118913
 弁護士 杉村 光嗣
 (74) 代理人 100165951
 弁理士 吉田 憲悟

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 正及び負の同時イオン化による分析物の質量分析のための装置

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

目標分子分析物のイオン化のための装置であって、

正帯電分子イオン及びフラグメントイオンを放出し、1 ~ 2 eV の帯域広がりをも有し 7 0 eV で動作するように構成される電子衝撃イオン源と、

負帯電分子イオン及びフラグメントイオンを放出し、0 eV ~ 1 0 eV の間で動作するように構成され、また、± 0 . 1 eV の帯域幅のために構成されるトロコイド状電子モノクロメータと、

前記電子衝撃イオン源の電子ビームの経路に沿って配置されるコリメータ電極の第 1 のセットと、

前記トロコイド状電子モノクロメータの電子ビームの経路に沿って配置されるコリメータ電極の第 2 のセットとを備え、

前記トロコイド状電子モノクロメータは、前記トロコイド状電子モノクロメータの前記電子ビームの前記経路によって規定される電子偏向領域を備え、電子は、電子のトロコイド状運動によって電子の出口からオフセットされ得るポイントで前記電子偏向領域に入り、

前記電子ビーム及び気体分子ストリームの少なくとも一方用の入口を有する少なくとも 1 つのイオン化チャンバであって、イオンリペラー板を備え、出力経路に沿ってイオンを放出するように構成される、前記少なくとも 1 つのイオン化チャンバと、

電子コレクタ及び電子目標板の 2 つのセットであって、両方のセットは前記電子ビーム

10

20

のそれぞれの電子ビームの経路に沿って配置され、前記電子ビーム間の距離は調整可能である、前記電子コレクタ及び電子目標板の2つのセットと、

少なくとも1つの質量分析部及び正と負の両方のイオン採取が可能なイオン目標板とを備える、前記装置。

【請求項2】

前記電子衝撃イオン源及び前記トロコイド状電子モノクロメータが、単一イオン化チャンバの周りに位置決めされる、請求項1に記載の装置。

【請求項3】

静電偏向器が、反対の電荷のイオンを、複数の質量分析部によって質量分析の前に分離し、極性切換えについての必要性なしで、正イオンと負イオンの同時検出を可能にする、請求項1に記載の装置。

10

【請求項4】

少なくとも1つの質量分析部が、極性切換え4重極を備える、請求項1に記載の装置。

【請求項5】

前記電子衝撃イオン源用の第1のイオン化チャンバ及び前記トロコイド状電子モノクロメータ用の第2のイオン化チャンバを更に備える、請求項1に記載の装置。

【請求項6】

前記電子衝撃イオン源及び前記トロコイド状電子モノクロメータが、化合物を、前記電子衝撃イオン源からの前記化合物の特徴的な正イオン質量フラグメントスペクトルによって、また、前記トロコイド状電子モノクロメータからの前記化合物の特徴的な負イオン質量スペクトルによって同時にイオン化するように構成される、請求項1に記載の装置。

20

【請求項7】

前記トロコイド状電子モノクロメータが、入射分子の分子アニオンを生成するように調整されるように構成される、請求項1に記載の装置。

【請求項8】

前記トロコイド状電子モノクロメータが、入射分子の特徴的なフラグメントイオンを生成するように調整されるように構成される、請求項1に記載の装置。

【請求項9】

気相分子が、前記電子衝撃イオン源からの入射電子に遭遇し、正帯電分子イオン及び/またはフラグメントイオンを生成し、気相分子が、前記トロコイド状電子モノクロメータを通過し、電子捕獲によって負帯電イオンを発生する、請求項1に記載の装置。

30

【請求項10】

質量分析計において使用するためのイオン化方法であって、

2つのイオン源を使用して2つの電子ビームを発生することであって、前記イオン源が、

(a) 試料分子の部分集団の電子衝撃イオン化のための、1～2 eVの帯域広がりを含む70 eVイオン源を備える第1のイオン源、及び、

(b) 試料分子の部分集団の電子捕獲イオン化のための、< 0.1 eVの帯域広がりを有し0～12 eVの間で動作する第2のイオン源を備える、前記発生することと、

試料分子の流れを、イオン化チャンバに対する単一分子ストリームとしてまたは2つのイオン化チャンバ間の分割流として前記2つのイオン源に方向付けることと、

40

正及び負の質量スペクトルを発生することを含む、分析物の定量的または定性的決定において、前記2つのイオン源によって発生した前記2つの電子ビームにおいてイオンの質量分析を実施することを含む、前記方法。

【請求項11】

化合物の同時イオン化を、前記第1のイオン源からの前記化合物の特徴的な正イオン質量フラグメントスペクトルによって、また、前記第2のイオン源からの前記化合物の負イオン質量スペクトルによって取得することを更に含む、請求項10に記載の方法。

【請求項12】

前記第2のイオン源に放出される前記試料分子の分子アニオンを特に発生させるため、

50

前記第 2 のイオン源を調整することを更に含む、請求項 10 に記載の方法。

【請求項 13】

前記第 2 のイオン源に放出される前記試料分子の特徴的なフラグメントイオンを特に発生させるため、前記第 2 のイオン源を調整することを更に含む、請求項 10 に記載の方法。

【請求項 14】

気体分子の流れを分割するためのシステムであって、

分子の電子衝撃イオン化用の電子銃を備える第 1 のイオン源を含む第 1 のイオン化チャンバと、

分子の電子捕獲イオン化用のトロコイド状電子モノクロメータを備える第 2 のイオン源を含む第 2 のイオン化チャンバとを備え、

前記第 1 のイオン化チャンバ及び前記第 2 のイオン化チャンバは、気体分子の流れに沿って、並行して配置され、

前記第 1 のイオン源と前記第 2 のイオン源との間の分子の分割比が、個々の分析の要件を満たすように調整されるように構成される、前記システム。

【請求項 15】

正イオンまたは負イオンをモニターするように構成される 2 つの別個の質量分析部を更に備える、請求項 14 に記載のシステム。

【請求項 16】

前記電子銃及び前記トロコイド状電子モノクロメータが、2 つに分割されるのではなく、単一イオン化チャンバに導入される分子のストリームを目指すように位置決めされる、請求項 14 に記載のシステム。

【請求項 17】

正イオンと負イオンの両方を検出するように構成される質量分析部を更に備える、請求項 16 に記載のシステム。

【請求項 18】

正イオンまたは負イオンをモニターするように構成される 2 つの別個の質量分析部に対して正及び負イオンの流れを方向付けるように構成される静電偏向器を更に備える、請求項 16 に記載のシステム。

【請求項 19】

前記電子銃及び前記トロコイド状電子モノクロメータイオン源が、正及び負イオンを順次生成するため、交互に動作するように構成される、請求項 16 に記載のシステム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

関連出願の相互参照

本出願は、「Detecting Chemical Compounds」という名称で、2015年3月29日に提出された米国仮出願第62/139,758号に対して優先権を主張し、その出願は、参照により本明細書に組込まれる。

【0002】

本発明は、分子の質量分析用の方法及びそのための装置を対象とする。

【背景技術】

【0003】

質量分析計(MS: mass spectrometer)は、液体及び気体内の化合物の分析及び反応機構の調査のため分析化学の分野で広く使用されている。MSは、未知の化学物質の複雑な混合物の分析及び/または未知の化学物質の定量化のためにガスクロマトグラフ(GC: gas chromatograph)としばしば結合される。こうした機器は、法医学調査及び環境調査において広範に使用されてきた。

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

例えば質量分析計において使用するため、関心の目標分子分析物のイオン化のための方法及び装置。幾つかの実施態様において、薄い分子ストリームは、単一モードまたは分割モードで放出され、順次にまたは付随的に設置された電子衝撃イオン源とトロコイド状電子モノクロメータの両方に遭遇する。第1のイオン源は、高エネルギー電子（約70 eV）を放出して、特徴的な正帯電質量フラグメントスペクトルを発生し、一方、第2のイオン源は、狭帯域幅で低エネルギー電子を放出して、電子捕獲イオン化によって負分子イオンまたは他のイオンを発生する。2重イオン源は、ガスクロマトグラフ等の分析機器に、及び、極性切換え4重極質量分析部等の任意の数の質量分析部に、または、複数の質量分析部に結合されてもよい。

10

【0005】

本明細書で述べる技術は幾つかの利点を有する。例えば、目標分子のアイデンティティは、分析物の正のEI質量フラグメントスペクトルが負のTEM質量スペクトルと同時に生成されるため、高い信頼度で決定される場合がある。多くの分析物はEIイオン化によって分子カチオンを生成しないが、分子アニオンは、TEMイオン源から生成される場合がある。質量分析の構成（例えば、単一イオン化チャンバ）及び方法（例えば、静電偏向器）に応じて、これらの2重質量スペクトルは、著しく増大されたデータ粒度及び選択性を提供しながら、感度の損失が最小の状態を取得される場合がある。

20

【0006】

本発明の概念の他の特徴及び利点は、本発明の概念の態様を例として示す以下の説明から明らかになるはずである。

【0007】

本発明の概念の態様及び特徴は、添付図面を参照して例示的な実施形態を述べることによってより明らかになる。

【図面の簡単な説明】

【0008】

【図1A】2つのイオン源が同じイオン化チャンバを狙う2重イオンシステムについての略図を示す。

【図1B】2つのイオン化チャンバ間で分割流が適用される2重イオンシステムについての略図を示す。

30

【図2A】EI/TEM 2重イオンシステムを等角投影分析物で示す。

【図2B】イオン化源経路の間隔を示す。

【図3】2重イオン源の切欠き図を示す。

【図4】正の電子衝撃と負の電子捕獲の両方の質量スペクトルの出力を示す。

【発明を実施するための形態】

【0009】

或る実施態様が述べられるが、これらの実施形態は、単に例として提示され、保護の範囲を制限することを意図しない。本明細書で述べる装置、方法、及びシステムは、種々の他の形態で具現化されてもよい。更に、本明細書で述べる例示的な方法及びシステムの形態における種々の省略、置換、及び変更は、保護の範囲から逸脱することなく行われてもよい。

40

【0010】

開示されるのは、目標分子分析物のイオン化のための装置である。幾つかの実施態様において、薄い分子ストリームは、単一モードまたは分割モードで放出され、順次にまたは付随的に設置された電子衝撃イオン源とトロコイド状電子モノクロメータの両方に遭遇する。第1のイオン源は、高エネルギー電子（約70 eV）を放出して、特徴的な正帯電質量フラグメントスペクトルを発生し、一方、第2のイオン源は、狭帯域幅で低エネルギー電子を放出して、電子捕獲イオン化によって負分子イオンまたは他のイオンを発生する。2重イオン源は、ガスクロマトグラフ等の分析機器に、及び、極性切換え4重極質量分析

50

部等の任意の数の質量分析部に、または、複数の質量分析部を組み合わせた静電偏向器に結合されてもよい。

【0011】

種々の実施態様において、目標分子分析物のイオン化のための装置は、正帯電分子イオン及びフラグメントイオンを放出し、 $1 \sim 2 \text{ eV}$ の帯域広がりを持つ 70 eV で動作するように構成される電子衝撃イオン源と、負帯電分子イオン及びフラグメントイオンを放出し、 0 eV と 10 eV との間で動作するように構成され、また、 $\pm 0.1 \text{ eV}$ の帯域幅のために構成されるトロコイド状電子モノクロメータと、電子衝撃イオン源の電子ビームの経路に沿って配置されるコリメータ電極の第1のセットと、トロコイド状電子モノクロメータの電子ビームの経路に沿って配置されるコリメータ電極の第2のセットとを含んでもよい。トロコイド状電子モノクロメータは、トロコイド状電子モノクロメータの電子ビームの経路によって規定される電子偏向領域を含んでもよく、電子は、電子のトロコイド状運動によって電子の出口からオフセットされる場合があるポイントで電子偏向領域に入る。装置は、電子ビーム及び気体分子ストリームの少なくとも一方用の入口を有する少なくとも1つのイオン化チャンバであって、イオンリペラー板を備え、出力経路に沿ってイオンを放出するように構成される、少なくとも1つのイオン化チャンバと、電子コレクタ及び電子目標板の2つのセットであって、両方のセットは電子ビームのそれぞれの電子ビームの経路に沿って配置される、電子コレクタ及び電子目標板の2つのセットとを更にも含む。電子ビーム間の距離は調整可能であってよい。装置は、同様に、少なくとも1つの質量分析部及び正と負の両方のイオン採取が可能なイオン目標板を含んでもよい。

10

20

【0012】

種々の実施態様において、質量分析計において使用するためのイオン化方法は、2つのイオン源を使用して2つの電子ビームを発生することを含んでもよい。イオン源は、(a) 試料分子の部分集団の電子衝撃イオン化のための、 $1 \sim 2 \text{ eV}$ の帯域広がりを持つ 70 eV イオン源を備える第1のイオン源、及び、(b) 試料分子の部分集団の電子捕獲イオン化のための、 $< 0.1 \text{ eV}$ の帯域広がりを持つ $0 \sim 12 \text{ eV}$ の間で動作する第2のイオン源を含んでもよい。方法は、試料分子の流れを、イオン化チャンバに対する単一分子ストリームとしてまたは2つのイオン化チャンバ間の分割流として2つのイオン源に方向付けること、及び、正及び負の質量スペクトルを発生することを含む、分析物の定量的または定性的決定において、2つのイオン源によって発生した2つの電子ビームにおいてイオンの質量分析を実施することを更にも含む。

30

【0013】

種々の実施態様は、気体分子の流れを分割するためのシステムを含んでもよく、システムは、分子の電子衝撃イオン化用の電子銃を備える第1のイオン源を収容する第1のイオン化チャンバと、分子の電子捕獲イオン化用のトロコイド状電子モノクロメータを備える第2のイオン源を収容する第2のイオン化チャンバとを含んでもよい。第1のイオン源と第2のイオン源との間の分子の分割比は、個々の分析の要件を満たすように調整されてもよい。

【0014】

幾つかの実施態様において、システムは、2つの電子ビームを1つまたは2つの別個のイオン化チャンバに導入する；1つのビームはEI源からのものであり、他のビームはTEM源からのものである。電子を放出するため、各源内のフィラメントを電流が通過する。これらの電子の平均エネルギーは、フィラメント電位を調整することによって調整されてもよく、電子は広範囲の運動エネルギーを持つ。

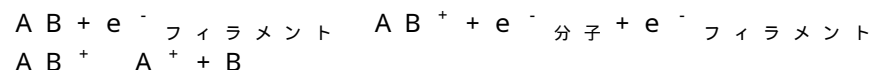
40

【0015】

1周波数使用式イオン源は「ハード(hard)」電子衝撃(EI: electron-impact)イオン化源である。これらのイオン化源は、通常、 $10^{-5} \sim 10^{-6}$ トルの真空の内部で高温フィラメントを使用して 70 eV で気相分子の薄いストリームを衝突させることによって動作する。電子は、フィラメントから磁気誘引され、 $\pm 1 \sim 2 \text{ eV}$ の帯域幅を持つ狭いビームに集束される。このビームは、イオン化チャンバを通過し

50

、イオン化チャンバ内で、電子は目標分子と衝突する。高エネルギー電子と衝突すると、目標分子は、フラグメント化パターンとして知られる、異なる m/z 比を有する特徴的な正イオンにフラグメント化する。分子 (AB) のイオン化は、一般に、以下の反応経路によって起こる。



【0016】

これらのフラグメント化パターンは、未知の化合物の同定のために文献の質量スペクトルと比較されてもよい、または、観測されるイオン電流の量に基づいて目標化合物を定量化するために使用されてもよい。多くの定量的ガスクロマトグラフ法/質量分析法はE Iイオン化に依存する。

10

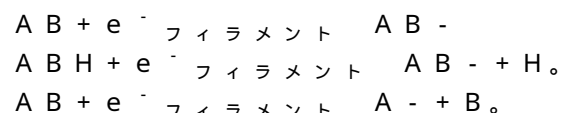
【0017】

E Iイオン化は、定量的データを生成するよく確立された能力を有するが、欠点がある。米国国立標準技術研究所によれば、全ての化合物の約 $1/3$ は、標準的なE I条件下でその分子イオンを喪失することになる。分子イオンは、化合物アイデンティティに関する最大の情報を提供するため有用である。理想的なイオン源は、分子イオンを依然として保持しながら、文献のスペクトルと比較され得る定量的で機微なデータを生成することになる。

【0018】

電子捕獲 (EC: electron capture) 負イオン質量分析は、ペアレント分子のより制限されたまたは更にゼロに近いフラグメント化をもたらす場合がある代替のイオン化機構である。E Iイオン化と違って、ECイオン化プロセス内の電子は、低エネルギーを有する。正帯電フラグメントイオンではなく、これらの源は、負帯電分子イオン (M^-) を主に生成する。分子イオンマイナス水素 ($M-H^-$) 及び更なるフラグメントは、同様に、以下の反応経路によって発生してもよい。

20



【0019】

トロコイド状電子モノクロメータ (TEM: trochoidal electron monochromator) は、「ソフト (soft)」負イオン化源として使用されてもよい。TEMイオン化は、狭い帯域の分子が入射電子ビームによってイオン化される点でE Iと同様である。一般に、TEM電子は単色である。共鳴電子捕獲は 1 eV より小さい電圧を必要とする場合があるため、TEMの帯域幅は、 $\pm 0.1\text{ eV}$ より小さい。電子のこの狭い帯域幅を約 $0\text{ eV} \sim 10\text{ eV}$ の間に調整できることは、特定の試料化合物の選択的なイオン化を可能にし、質量分析部と組み合わせられると、選択性を付加し、質量スペクトルを簡略化する。幾つかの実施態様において、TEM源電位をスキャンすることは、複数の異なるイオンが、分析物から生成されることを可能にする。

30

【0020】

ハードイオン化は、分子イオンを保持し得る源 (例えば、化学イオン化) と組み合わせられて単一機器になってもよい。目標分子について分子イオン及びフラグメント化パターンを同時に発生させながら、これらの機器は、時として、低いMS採取レートまたは両方の源からの付加的イオン信号を有し、それが、未知物のライブラリ同定を複雑にし得る。

40

【0021】

この説明は、ECイオン化源としてE Iイオン源とTEMとの組み合わせを詳述する。単一イオン化チャンバを利用する例において、源は、単一ポイントまたは2つの異なるポイントに分子ビームの的を絞る。しかし、目標分子は、同様に、2つの別個のイオン源の間で分割されてもよい。源は、分子ストリームが分割モードにあるかどうかに応じて、単一イオン化チャンバまたは2つのイオン化チャンバを使用して構成されてもよい。このセットアップは、一方の源が正イオンを発生し、他の源が負イオンを発生するため2つの非

50

干渉質量スペクトルを発生する。正イオンフラグメント化パターンは、試料成分の定量化及びライブラリ同定のために使用されてもよく、一方、負イオンスペクトルは分子イオンを形成することに寄与してもよい。

【0022】

そのため、イオン源は、質量分析計に導入される分析物の正と負の同時のイオン化のために本明細書で述べられる。正イオン源が、通常、70 eVに調整され、一方、負イオン源は、分子イオン等の所望のアニオンを放出するように調整されてもよい。2重イオン源は、正及び負の両方のイオン採取が可能な任意のタイプ及び数の質量分析部と結合されてもよい。これらの技法は、定性的に及び/または定量的に目標化合物を分析するため、未知化合物を同定するため、化学反応を調査するため、または、高精度でかつ選択性のある質量分析を必要とする任意の使用のために使用されてもよい。

10

【0023】

幾つかの実施態様において、正イオン源は、数 eV の広い帯域幅を有し広い範囲の電位を生成することが可能な標準的な電子衝撃イオン源である。幾つかの実施態様において、第2のイオン源は、 ± 0.1 eV の狭い帯域幅を有し約 0 eV ~ 10 eV の間で動作するトロコイド状電子モノクロメータである。2重イオン源は、正と負の両方のスペクトルが一度に発生するように、分子ビームの流路に沿って互いに付随的にまたは平行に設置されてもよい。

【0024】

最新の質量分析計において、EI源は、通常、一連のコリメータレンズを利用して、入射電子を約 1 ~ 2 eV の帯域幅を有する狭いビームに集束させる。これらの源は、通常、70 eV で動作して、不変質量フラグメント化を発生する。その理由は、分子のイオン化断面が、一般に、この電位において最大であるからである。

20

【0025】

幾つかの実施態様において、TEM源は、低エネルギーで動作し、また目標分析物の電子捕獲イオン化によって共鳴する周波数をよりよく達成するため調整可能であってよい。TEM源が生成する低エネルギー電子は、一連のコリメータレンズを通して閉じ込められ、直交する電界及び磁界を通して送出されてもよい。交差する電界及び磁界は、電子が通過するときに電子のトロコイド状運動を生成し、トロコイド状運動は、電子が転動するときの円上の固定ポイントの移動を記述する。異なるエネルギーを有する電子は異なるように偏向されるため、通常のシナリオにおいて、 > 0.1 eV の狭いエネルギー広がりを持つ電子が放出される。

30

【0026】

図1A及び図1Bは、2重イオンシステムについての略図を示す。図1Aにおいて、両方のイオン源が、同じイオン化チャンバを狙う。図1Bにおいて、分割流が2つのイオン化チャンバの間で適用される。2重イオン源に対する2つのアプローチが示される。図1Aは、EI及びTEM源23a~23bが単一イオン化チャンバ21aの周りに位置決めされる構成を示す。正及び負のイオンは、反対の電荷のイオンを測定することが可能な質量分析部22に引込まれる。これは、質量分析の前に反対の電荷のイオンを分離する静電偏向器であってもよい。図1Bは、分子ストリームが、2つのイオンチャンバ21b~21c及び質量分析部24a~24bの間で分割される構成を示す。一方のチャンバはEI源23cを含み、一方、他のチャンバはTEM源23dを含む。幾つかの実施態様において、この設計は、分子ストリームの分割比に比例する各検出器についての感度の減少をもたらす。幾つかの実施態様において、図1A及び図1Bに示す質量分析部はそれぞれ、1つまたは複数の検出器25a~25cを含む。

40

【0027】

図2Aは、例えば、単一イオン化チャンバと結合したEI/TEM 2重イオン源システムを等角投影で示す。示されるのは、TEM及びEI源用の2つのフィラメント1a、1b、コリメータ電極2a~2c、12a~12c、電子偏向領域4a~4b、コリメータ電極6a~6cの第2のセット、電子ビーム及び気体分子ストリーム7用の入口を有する

50

イオン化チャンバ、イオンリペラー板 8、電子コリメータレンズ / 電子コレクタ 9 a ~ 9 b、13 a ~ 13 b の最後のセット、電子目標板 14 a ~ 14 b である。TEM 電子は、電子 5 のトロコイド状運動によって電子の出口からオフセットする点があるポイント 3 で偏向領域に入る。可変角度 15 は、半分の角度が軸 Y に平行になるように存在し、また、幾つかの実施態様において、調整可能である。イオン化チャンバ出口 10 及びイオン抽出光学部品 11 a ~ 11 c が示され、それらは、2 重イオン源から離れ、また、正と負の両方のイオンを下流に質量分析部に入るように収束させるために使用されてもよい。イオン化源経路の間隔は図 2 B に示される。電子ビーム間の距離は、距離 31 において軸 Z に沿って調整されてもよい。EI 及び TEM 源は、同様に、交互モードで動作する可能性があり、そのモードにおいて、2 つのビームはイオン化チャンバに同時に達しないが、迅速に循環して、正及び負のイオンを順次に迅速に生成する。このイオン源は、 10^{-6} トルに達するまたはそれを越える真空中に耐えるように設計される金属ハウジング (図示せず) 内に収容されてもよい。

10

【0028】

単一イオン化チャンバが使用されると、気相分子が、EI 源からの入射電子に最初に遭遇し、正帯電分子及び / またはフラグメントイオンを生成する。距離 31 の後に、残りの気相分子は、TEM 源を通過し、電子捕獲によって、負帯電イオンを更に発生する。イオンは、軸 Z に沿ってコリメートされ、例えば、正及び負のイオンの同時検出が可能な任意の質量分析部を使用して分析される。イオン化チャンバは、最初に EI 源そして TEM 源を有するように示されるが、イオン化チャンバの順序は、分析の範囲に応じて変更されてもよい。

20

【0029】

図 3 は、単一イオン化チャンバを有する 2 重イオン源の断面を示す。フィラメント、検出領域、及びイオン化チャンバは、共に取付けられるハウジング内に収容される。この設計において、EI 及び TEM イオン源は、イオン化チャンバ 7 の中心の軸ポイントに沿って角度 15 で直交して設置される。他の構成、例えば、平行なイオン源が使用されてもよい。フィラメント 1 a、1 b は支持体 19 a ~ 19 d によって保持され、電子はカバー板 20 a ~ 20 b を通して放出される。入口電極 2 a ~ 2 c は、電磁リード 18 によって充電され、TEM の偏向領域内に電子を放出する。嵌合スリーブ 16 a によって内部に保持される電極 6 a ~ 6 c は、電子を更にコリメートし、イオン化チャンバ内に電子を放出する。TEM の終端は、コリメータレンズ 9 a ~ 9 b、目標板 14 a、及び端板 17 a を含む。

30

【0030】

EI 源は、カバー板 20 b 及び集束レンズ 12 a ~ 12 c を通して電子を放出する。イオン源は嵌合スリーブ 16 b によってイオン化チャンバに接続する。EI 終端は、最終電極 13 a ~ 13 b、目標板 14 b、及び端板 17 b を収容する。

【0031】

幾つかの実施態様において、2 重イオン源システムは、限定はしないが、イオントラップ、4 重極、3 重 4 重極、イオンサイクロトロン、磁気セクタ、またはフーリエ変換装置を含む任意の数及びタイプの質量分析部に結合される。図 1 A に示す構成において、正と負の両方のイオンを同時に分析することが可能な質量分析部が使用される。この採取モードが可能である質量分析部の一例は、極性切換え 4 重極である。代替的に、静電偏向器は、正及び負電荷のイオンを別個のビームに分離してもよい。静電偏向器は、データ粒度を喪失させる点がある極性切換えについての必要性なしで正及び負のイオンを同時検出するため 2 つの質量分析部に結合された。

40

【0032】

幾つかの実施態様において、本明細書で述べるイオン源を制御する機器は、適切なデータ採取 / 分析ソフトウェアを有するコンピュータ端末と通信状態にあって、質量分析計からの情報を、分析者によって解釈され得る出力に変換する。

【0033】

50

図4は、アミノ酸グリシンの質量スペクトルを使用して、2重イオン源システムの考えられる出力を示す。グリシンの正のEI質量スペクトル(上部)が示される。この分子は、10%より小さい相対存在量で分子イオン(M^+)を放出し、それは、複雑な試料内のノイズと識別することがしばしば困難である。実際には、推定される分子の30%は、70 eVで動作する源によってイオン化されると、分子イオンを全く放出することができない。1 eV ~ 12 eVの間のグリシンのTEM質量スペクトル(下部)が同様に示される。電子衝撃質量スペクトルと違って、グリシンのはるかに少ないフラグメント化が存在する。これは、スペクトルにおいて $M - H^+$ イオンをベースイオンにする効果を有する。正のEIスペクトル及び $M - H^+$ イオンの採取は、化合物同定及び/または複雑な混合物の特徴付けならびに法医学調査を支援する場合がある。

10

【0034】

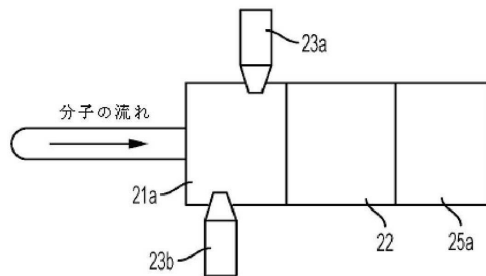
本明細書で述べる電極は、限定はしないが、タングステン、ステンレス鋼、タンタル、及びモリブデンを含む種々の金属及び合金で作られてもよい。

【0035】

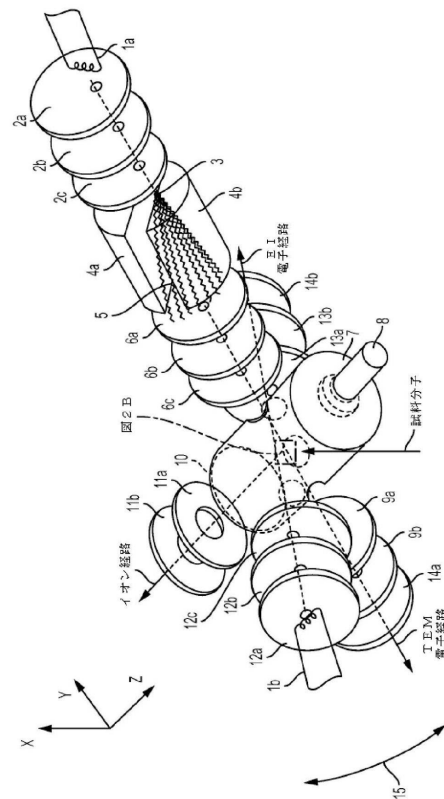
本明細書で述べる以外の多くの他の実施態様が使用されてもよく、任意のこうした実施態様が、添付の特許請求の範囲によって包含されてもよい。本開示は或る例示的な実施形態及び適用形態を提供するが、本明細書で述べる特徴及び利点の全てを提供しない実施形態を含む、当業者に明らかである他の実施形態が、同様に、本開示の範囲内にある。したがって、本開示の範囲は、添付の特許請求の範囲を参照することによってのみ規定されることを意図する。

20

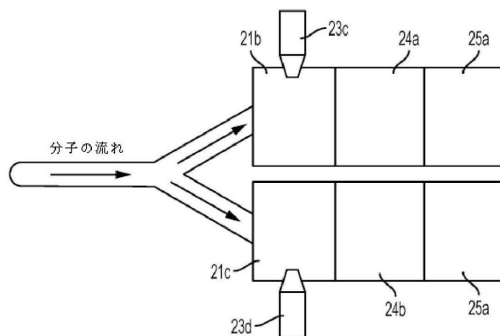
【図1A】



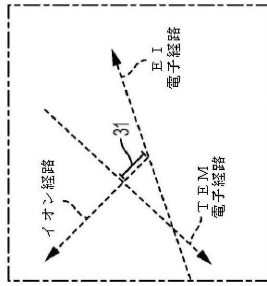
【図2A】



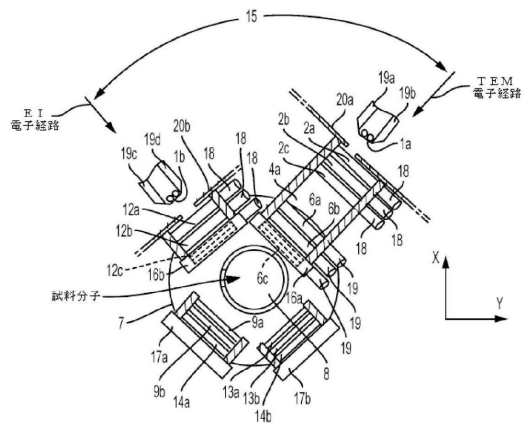
【図1B】



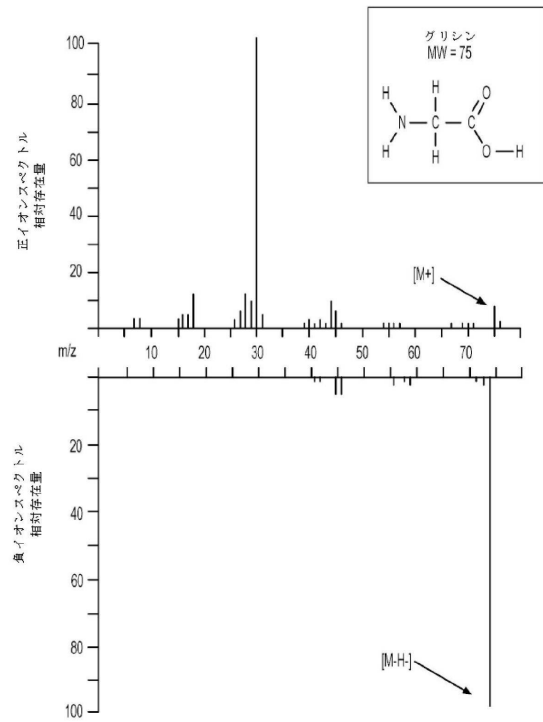
【図 2 B】



【図 3】



【図 4】



フロントページの続き

(72)発明者 ニコラス ウィルソン

アメリカ合衆国 マサチューセッツ州 02144 サマービル アッシュランド ストリート
15 アpartment 1エル

審査官 右 高 孝幸

(56)参考文献 特表平7-508127 (JP, A)

特開2004-342620 (JP, A)

米国特許第4933551 (US, A)

米国特許出願公開第2007/0015158 (US, A1)

米国特許出願公開第2014/0209814 (US, A1)

国際公開第03/103007 (WO, A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H01J 49/14

G01N 27/62