

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第5889403号
(P5889403)

(45) 発行日 平成28年3月22日 (2016. 3. 22)

(24) 登録日 平成28年2月26日 (2016. 2. 26)

(51) Int. Cl. F I
 HO 1 J 49/42 (2006. 01) HO 1 J 49/42
 GO 1 N 27/62 (2006. 01) GO 1 N 27/62 E

請求項の数 15 (全 16 頁)

(21) 出願番号	特願2014-513264 (P2014-513264)	(73) 特許権者	510075457
(86) (22) 出願日	平成24年5月30日 (2012. 5. 30)		ディーエイチ テクノロジーズ デベロッ プメント プライベート リミテッド
(65) 公表番号	特表2014-517478 (P2014-517478A)		シンガポール国 7 3 9 2 5 6 シンガポ ール, マーシリング インダストリアル
(43) 公表日	平成26年7月17日 (2014. 7. 17)		エステート ロード 3 3 3 ナンバ ー04-06
(86) 国際出願番号	PCT/IB2012/001054	(74) 代理人	100078282
(87) 国際公開番号	W02012/164378		弁理士 山本 秀策
(87) 国際公開日	平成24年12月6日 (2012. 12. 6)	(74) 代理人	100113413
審査請求日	平成27年3月2日 (2015. 3. 2)		弁理士 森下 夏樹
(31) 優先権主張番号	61/493, 364	(72) 発明者	テイト, スティーブン エー. カナダ国 エル4エム 7ケー4 オンタ リオ, バリー, サン キング クレセ ント 42
(32) 優先日	平成23年6月3日 (2011. 6. 3)		最終頁に続く
(33) 優先権主張国	米国 (US)		

(54) 【発明の名称】 スキャン内ダイナミックレンジを改善するための可変窓バンドパスフィルタリングを使用する調査スキャンからのイオンの除去

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

ある質量範囲からイオンをバンドパスフィルタリングするためのシステムであって、
 質量分析器を含むタンデム質量分析計であって、前記タンデム質量分析計は、異なる調整パラメータ値を使用して、異なる質量選択窓幅でスキャンを行うことが可能であり、ある質量範囲のフルスキャンを行う、タンデム質量分析計と、
 前記タンデム質量分析計と通信するプロセッサと
 を備え、前記プロセッサは、
 前記タンデム質量分析計から、前記フルスキャンに対するフルスペクトルを受信することと、
 前記フルスペクトルの第1の質量選択窓を選択し、第1の組の調整パラメータ値を選択することと、
 前記タンデム質量分析計に、前記第1の組の調整パラメータ値を使用して、前記第1の質量選択窓の第1のスキャンを行うように命令することと、
 前記タンデム質量分析計から、前記第1のスキャンに対する第1のスペクトルを受信することと、
前記質量範囲の前記第1の質量選択窓に対する前記第1のスペクトルからの値を追加することによって前記質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルを生成することと
 を行う、システム。

【請求項 2】

前記フルスキャンは、事前スキャンを備えている、請求項 1 に記載のシステム。

【請求項 3】

前記フルスキャンは、以前の調査スキャンを備えている、請求項 1 または請求項 2 に記載のシステム。

【請求項 4】

前記プロセッサは、

前記フルスペクトルの 1 つ以上の追加の質量選択窓を選択し、1 つ以上の追加の組の調整パラメータ値を選択することであって、前記第 1 の質量選択窓および前記 1 つ以上の追加の質量選択窓は、前記フルスペクトル内で重複しない、ことと、

前記タンデム質量分析計に、前記 1 つ以上の追加の組の調整パラメータ値を使用して、前記 1 つ以上の追加の質量選択窓の 1 つ以上のスキャンを行うように命令することと、

前記タンデム質量分析計から、前記 1 つ以上のスキャンに対する 1 つ以上のスペクトルを受信することと、

前記バンドパスフィルタリングされたスペクトルに、前記質量範囲の前記 1 つ以上の追加の質量選択窓に対する前記 1 つ以上のスペクトルからの値を追加することと

をさらに行う、請求項 1 ~ 3 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

【請求項 5】

前記プロセッサは、

前記フルスペクトルの第 2 の質量選択窓を選択し、第 2 の組の調整パラメータ値を選択することであって、前記第 1 の質量選択窓と前記第 2 の質量選択窓とは、前記フルスペクトル内で重複しない、ことと、

前記タンデム質量分析計に、前記第 2 の組の調整パラメータ値を使用して、前記第 2 の質量選択窓の第 2 のスキャンを行うように命令することと、

前記タンデム質量分析計から、前記第 2 のスキャンに対する第 2 のスペクトルを受信することと、

前記バンドパスフィルタリングされたスペクトルに、前記質量範囲の前記第 2 の質量選択窓に対する前記第 2 のスペクトルからの値を追加することと

をさらに行う、請求項 1 ~ 4 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

【請求項 6】

プロセッサは、

前記第 1 の質量選択窓と前記第 2 の質量選択窓との間の前記フルスペクトルの第 3 の質量選択窓を選択することと、

前記バンドパスフィルタリングされたスペクトルに、前記質量範囲の前記第 3 の質量選択窓に対するゼロ値を追加することと

をさらに行う、請求項 1 ~ 5 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

【請求項 7】

前記第 3 の質量選択窓幅は、高強度イオンを備えている、請求項 1 ~ 6 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

【請求項 8】

前記第 3 の質量選択窓幅は、高イオン計数率を備えている、請求項 1 ~ 7 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

【請求項 9】

前記第 3 の質量選択窓幅は、以前に断片化されたイオンのリストからのイオンを備えている、請求項 1 ~ 8 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

【請求項 10】

前記第 1 の質量選択窓、前記第 2 の質量選択窓、および前記第 3 の質量選択窓は、同一の幅を有していない、請求項 1 ~ 9 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

【請求項 11】

前記第 1 の組の調整パラメータ値および前記第 2 の組の調整パラメータ値は、少なくとも

10

20

30

40

50

も 1 つの値を共有しない、請求項 1 ~ 10 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

【請求項 12】

ある質量範囲から、イオンをバンドパスフィルタリングする方法であって、

質量分析器を含むタンデム質量分析計を使用して、ある質量範囲のフルスキャンに対するフルスペクトルを受信することであって、前記タンデム質量分析計は、異なる調整パラメータ値を使用して、異なる質量選択窓幅でスキャンを行うことが可能である、ことと、

前記フルスペクトルの第 1 の質量選択窓を選択し、第 1 の組の調整パラメータ値を選択することと、

前記タンデム質量分析計に、前記第 1 の組の調整パラメータ値を使用して、前記第 1 の質量選択窓の第 1 のスキャンを行うように命令することと、

10

前記タンデム質量分析計から、前記第 1 のスキャンに対する第 1 のスペクトルを受信することと、

前記質量範囲の前記第 1 の質量選択窓に対する前記第 1 のスペクトルからの値を追加することによって前記質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルを生成することと

を含む、方法。

【請求項 13】

前記フルスキャンは、事前スキャンを備えている、請求項 12 に記載の方法。

【請求項 14】

前記フルスキャンは、以前の調査スキャンを備えている、請求項 12 または請求項 13 に記載の方法。

20

【請求項 15】

有形のコンピュータ読み取り可能な記憶媒体を備えているコンピュータプログラム製品であって、前記記憶媒体のコンテンツは、プロセッサ上で実行される命令を伴うプログラムを含み、前記命令は、ある質量範囲からイオンをバンドパスフィルタリングする方法を行い、前記方法は、

システムを提供することであって、前記システムは、1 つ以上の個別のソフトウェアモジュールを備え、前記個別のソフトウェアモジュールは、測定モジュールおよびフィルタリングモジュールを備えている、ことと、

質量分析器を含むタンデム質量分析計を使用して、ある質量範囲のフルスキャンに対するフルスペクトルを受信することであって、前記タンデム質量分析計は、前記測定モジュールを使用して、異なる調整パラメータ値を使用し、異なる質量選択窓幅でスキャンを行うことが可能である、ことと、

30

前記フィルタリングモジュールを使用して、前記フルスペクトルの第 1 の質量選択窓を選択し、第 1 の組の調整パラメータ値を選択することと、

前記タンデム質量分析計に、前記測定モジュールを使用して、前記第 1 の組の調整パラメータ値を使用し、前記第 1 の質量選択窓の第 1 のスキャンを行うように命令することと、

前記測定モジュールを使用して、前記タンデム質量分析計から、前記第 1 のスキャンに対する第 1 のスペクトルを受信することと、

40

前記フィルタリングモジュールを使用して、前記質量範囲の前記第 1 の質量選択窓に対する前記第 1 のスペクトルからの値を追加することによって前記質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルを生成することと

を含む、コンピュータプログラム製品。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

(関連出願の引用)

本願は、米国仮特許出願第 61 / 493 , 364 号 (2011 年 6 月 3 日出願) の利益

50

を主張する。該仮出願は、参照によりその全体が本明細書に引用される。

【背景技術】

【0002】

タンデム質量分析計の質量分析器の検出器サブシステムは、飽和を被り得る。例えば、飽和は、検出サブシステムの総イオン計数率を超えると生じ得る。飽和はまた、単一のイオンピークの強度が、検出サブシステムの閾値強度を超えると生じ得る。

【0003】

タンデム質量分析計は、飽和が検出されると、それを除去するための種々の方法を採用している。例えば、ある方法は、プログラム制御下、自動的に、イオンビームを減衰させる。飽和が検出されると、イオンビームが、例えば、飽和のレベルに応答して、1%~100%減衰される。

10

【0004】

自動化方法を使用して、飽和を防止または回避することはまた、望ましくない影響を生み出し得る。例えば、背景イオンが、液体クロマトグラフィ(LC)時、着目イオンと同一時点で非常に強力である可能性がある。自動化方法は、強力イオンを見つけるが、強力背景イオンと着目イオンとを区別することができない。その結果、背景イオンを飽和から保護するために、イオンビームを減衰させる。一方、イオンビームの減衰は、着目イオンの強度をもはや検出不可能となる点まで低減させる。

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

20

【0005】

種々の実施形態では、飽和を生み出し得るイオンは、着目イオンが、汎用自動化飽和検出および除去方法によって影響を受けることを防止するために、選択的に、除去またはフィルタリングされる。本質的には、事前スキャンまたは以前の調査スキャンからのスキャンが、除去のためのイオンを識別するために使用される。次いで、1つ以上の後続調査またはスキャンが、識別されたイオンを除去するために使用される。飽和を生み出し得るイオンの除去に加え、本技法はまた、以前に分析または断片化されたイオンを除去するために使用することができる。

【0006】

タンデム質量分析計では、前駆体イオンが、第1の質量分析器内で選択され、断片化され、その断片は、第2の分析器または第1の分析器の第2のスキャンにおいて分析される。断片イオンスペクトルが、分子を識別するために使用されることができ、1つ以上の断片の強度が、試料中に存在する化合物の量を定量化するために使用されることができ。

30

本明細書は、例えば、以下の項目も提供する。

(項目1)

ある質量範囲からイオンをバンドパスフィルタリングするためのシステムであって、
質量分析器を含むタンデム質量分析計であって、前記タンデム質量分析計は、異なる調整パラメータ値を使用して、異なる質量選択窓幅でスキャンを行うことが可能であり、ある質量範囲のフルスキャンを行う、タンデム質量分析計と、

前記タンデム質量分析計と通信するプロセッサと

40

を備え、前記プロセッサは、

前記タンデム質量分析計から、前記フルスキャンに対するフルスペクトルを受信することと、

前記フルスペクトルの第1の質量選択窓を選択し、第1の組の調整パラメータ値を選択することと、

前記タンデム質量分析計に、前記第1の組の調整パラメータ値を使用して、前記第1の質量選択窓の第1のスキャンを行うように命令することと、

前記タンデム質量分析計から、前記第1のスキャンに対する第1のスペクトルを受信することと、

前記質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルを生成することであ

50

って、前記質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルは、前記質量範囲の前記第1の質量選択窓に対する前記第1のスペクトルからの値を含む、ことと
を行う、システム。

(項目2)

前記フルスキャンは、事前スキャンを備えている、項目1に記載のシステム。

(項目3)

前記フルスキャンは、以前の調査スキャンを備えている、項目1または項目2に記載のシステム。

(項目4)

前記プロセッサは、

前記フルスペクトルの1つ以上の追加の質量選択窓を選択し、1つ以上の追加の組の調整パラメータ値を選択することであって、前記第1の質量選択窓および前記1つ以上の追加の質量選択窓は、前記フルスペクトル内で重複しない、ことと、

前記タンデム質量分析計に、前記1つ以上の追加の組の調整パラメータ値を使用して、前記1つ以上の追加の質量選択窓の1つ以上のスキャンを行うように命令することと、

前記タンデム質量分析計から、前記1つ以上のスキャンに対する1つ以上のスペクトルを受信することと、

前記バンドパスフィルタリングされたスペクトルに、前記質量範囲の前記1つ以上の追加の質量選択窓に対する前記1つ以上のスペクトルからの値を追加することと

をさらに行う、項目1～3のうちのいずれか一項に記載のシステム。

(項目5)

前記プロセッサは、

前記フルスペクトルの第2の質量選択窓を選択し、第2の組の調整パラメータ値を選択することであって、前記第1の質量選択窓と前記第2の質量選択窓とは、前記フルスペクトル内で重複しない、ことと、

前記タンデム質量分析計に、前記第2の組の調整パラメータ値を使用して、前記第2の質量選択窓の第2のスキャンを行うように命令することと、

前記タンデム質量分析計から、前記第2のスキャンに対する第2のスペクトルを受信することと、

前記バンドパスフィルタリングされたスペクトルに、前記質量範囲の前記第2の質量選択窓に対する前記第2のスペクトルからの値を追加することと

をさらに行う、項目1～4のうちのいずれか一項に記載のシステム。

(項目6)

プロセッサは、

前記第1の質量選択窓と前記第2の質量選択窓との間の前記フルスペクトルの第3の質量選択窓を選択することと、

前記バンドパスフィルタリングされたスペクトルに、前記質量範囲の前記第3の質量選択窓に対するゼロ値を追加することと

をさらに行う、項目1～5のうちのいずれか一項に記載のシステム。

(項目7)

前記第3の質量選択窓幅は、高強度イオンを備えている、項目1～6のうちのいずれか一項に記載のシステム。

(項目8)

前記第3の質量選択窓幅は、高イオン計数率を備えている、項目1～7のうちのいずれか一項に記載のシステム。

(項目9)

前記第3の質量選択窓幅は、以前に断片化されたイオンのリストからのイオンを備えている、項目1～8のうちのいずれか一項に記載のシステム。

(項目10)

前記第1の質量選択窓、前記第2の質量選択窓、および前記第3の質量選択窓は、同一

10

20

30

40

50

の幅を有していない、項目 1 ~ 9 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

(項目 1 1)

前記第 1 の組の調整パラメータ値および前記第 2 の組の調整パラメータ値は、少なくとも 1 つの値を共有しない、項目 1 ~ 1 0 のうちのいずれか一項に記載のシステム。

(項目 1 2)

ある質量範囲から、イオンをバンドパスフィルタリングする方法であって、
質量分析器を含むタンデム質量分析計を使用して、ある質量範囲のフルスキャンに対するフルスペクトルを受信することであって、前記タンデム質量分析計は、異なる調整パラメータ値を使用して、異なる質量選択窓幅でスキャンを行うことが可能である、ことと、
前記フルスペクトルの第 1 の質量選択窓を選択し、第 1 の組の調整パラメータ値を選択することと、

10

前記タンデム質量分析計に、前記第 1 の組の調整パラメータ値を使用して、前記第 1 の質量選択窓の第 1 のスキャンを行うように命令することと、

前記タンデム質量分析計から、前記第 1 のスキャンに対する第 1 のスペクトルを受信することと、

前記質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルを生成することであって、前記質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルは、前記質量範囲の前記第 1 の質量選択窓に対する前記第 1 のスペクトルからの値を含む、ことと

を含む、方法。

(項目 1 3)

20

前記フルスキャンは、事前スキャンを備えている、項目 1 2 に記載の方法。

(項目 1 4)

前記フルスキャンは、以前の調査スキャンを備えている、項目 1 2 または項目 1 3 に記載の方法。

(項目 1 5)

有形のコンピュータ読み取り可能な記憶媒体を備えているコンピュータプログラム製品であって、前記記憶媒体のコンテンツは、プロセッサ上で実行される命令を伴うプログラムを含み、前記命令は、ある質量範囲からイオンをバンドパスフィルタリングする方法を行い、前記方法は、

システムを提供することであって、前記システムは、1 つ以上の個別のソフトウェアモジュールを備え、前記個別のソフトウェアモジュールは、測定モジュールおよびフィルタリングモジュールを備えている、ことと、

30

質量分析器を含むタンデム質量分析計を使用して、ある質量範囲のフルスキャンに対するフルスペクトルを受信することであって、前記タンデム質量分析計は、前記測定モジュールを使用して、異なる調整パラメータ値を使用し、異なる質量選択窓幅でスキャンを行うことが可能である、ことと、

前記フィルタリングモジュールを使用して、前記フルスペクトルの第 1 の質量選択窓を選択し、第 1 の組の調整パラメータ値を選択することと、

前記タンデム質量分析計に、前記測定モジュールを使用して、前記第 1 の組の調整パラメータ値を使用し、前記第 1 の質量選択窓の第 1 のスキャンを行うように命令することと

40

、
前記測定モジュールを使用して、前記タンデム質量分析計から、前記第 1 のスキャンに対する第 1 のスペクトルを受信することと、

前記フィルタリングモジュールを使用して、前記質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルを生成することであって、前記質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルは、前記質量範囲の前記第 1 の質量選択窓に対する前記第 1 のスペクトルからの値を含む、ことと

を含む、コンピュータプログラム製品。

【 0 0 0 7 】

当業者は、後述の図面が、例証目的に過ぎないことを理解するであろう。図面は、本教

50

示の範囲をいかようにも制限することを意図するものではない。

【図面の簡単な説明】

【0008】

【図1】図1は、本教示の実施形態が実装され得るコンピュータシステムを図示するブロック図である。

【図2】図2は、種々の実施形態による、ある質量範囲から、イオンをバンドパスフィルタリングするためのシステムを示す、概略図である。

【図3】図3は、種々の実施形態による、ある質量範囲から、イオンをバンドパスフィルタリングする方法を示す、例示的流れ図である。

【図4】図4は、種々の実施形態による、ある質量範囲から、イオンをバンドパスフィルタリングする方法を行う、1つ以上の個別のソフトウェアモジュールを含む、システムの概略図である。

10

【発明を実施するための形態】

【0009】

本教示の1つ以上の実施形態を詳細に説明する前に、当業者は、本教示が、その適用において、以下の発明を行うための形態に記載される、または図面に図示される、構造、構成要素の配列、およびステップの配列の詳細に制限されないことを理解するであろう。また、本明細書で使用される表現および専門用語は、説明の目的のためであって、制限としてみなされるべきではないことを理解されたい。

【0010】

20

(コンピュータ実装システム)

図1は、本教示の実施形態が実装され得る、コンピュータシステム100を図示するブロック図である。コンピュータシステム100は、情報を通信するためのバス102または他の通信機構と、情報を処理するためにバス102と結合されたプロセッサ104を含む。コンピュータシステム100は、プロセッサ104によって実行される命令を記憶するために、バス102に結合されるランダムアクセスメモリ(RAM)または他の動的記憶デバイスであり得るメモリ106も含む。メモリ106は、プロセッサ104によって実行される命令の実行の間、一時的変数または他の中間情報を記憶するためにも使用され得る。コンピュータシステム100は、プロセッサ104のための静的情報および命令を記憶するために、バス102に結合された読取専用メモリ(ROM)108または他の静的記憶デバイスをさらに含む。磁気ディスクまたは光ディスク等の記憶デバイス110は、情報および命令を記憶するために提供され、バス102に結合される。

30

【0011】

コンピュータシステム100は、情報をコンピュータユーザに表示するために、バス102を介して、ブラウン管(CRT)または液晶ディスプレイ(LCD)等のディスプレイ112に結合され得る。英数字および他のキーを含む入力デバイス114は、情報およびコマンド選択をプロセッサ104に通信するために、バス102に結合される。別のタイプのユーザ入力デバイスは、方向情報およびコマンド選択をプロセッサ104に通信し、ディスプレイ112上のカーソル移動を制御するためのマウス、トラックボール、またはカーソル方向キー等のカーソル制御116である。この入力デバイスは、典型的には、デバイスが平面において位置を指定することを可能にする2つの軸、すなわち、第1の軸(すなわち、x)および第2の軸(すなわち、y)において、2自由度を有する。

40

【0012】

コンピュータシステム100は、本教示を行うことができる。本教示のある実装によると、結果は、メモリ106内に含まれる1つ以上の命令の1つ以上のシーケンスをプロセッサ104が実行することに対応して、コンピュータシステム100によって提供される。そのような命令は、記憶デバイス110等の別のコンピュータ読み取り可能な媒体から、メモリ106内に読み込まれ得る。メモリ106内に含まれる命令のシーケンスの実行は、プロセッサ104に、本明細書に説明されるプロセスを行わせる。代替として、有線回路が、本教示を実装するためのソフトウェア命令の代わりに、またはそれと組み合わせ

50

て、使用され得る。したがって、本教示の実装は、ハードウェア回路およびソフトウェアの任意の具体的組み合わせに制限されない。

【0013】

用語「コンピュータ読み取り可能な媒体」は、本明細書で使用される場合、実行のために、命令をプロセッサ104に提供する際に関与する任意の媒体を指す。そのような媒体は、不揮発性媒体、揮発性媒体、および伝送媒体を含むが、それらに制限されない、多くの形態をとり得る。不揮発性媒体は、例えば、記憶デバイス110等の光学または磁気ディスクを含む。揮発性媒体は、メモリ106等の動的メモリを含む。伝送媒体は、バス102を備えている配線を含む、同軸ケーブル、銅線、および光ファイバを含む。

【0014】

コンピュータ読み取り可能な媒体の一般的形態として、例えば、フロッピー（登録商標）ディスク、フレキシブルディスク、ハードディスク、磁気テープ、または任意の他の磁気媒体、CD-ROM、デジタルビデオディスク（DVD）、ブルーレイディスク、任意の他の光学媒体、サムドライブ、メモリカード、RAM、PROM、およびEPROM、フラッシュ-EPROM、任意の他のメモリチップまたはカートリッジ、あるいはコンピュータが読み取ることができる、任意の他の有形媒体が挙げられる。

【0015】

コンピュータ読み取り可能な媒体の種々の形態は、実行のために、1つ以上の命令の1つ以上のシーケンスをプロセッサ104に搬送することに関わり得る。例えば、命令は、最初は、遠隔コンピュータの磁気ディスク上で搬送され得る。遠隔コンピュータは、命令をその動的メモリ内にロードし、モデムを使用して、電話回線を介して、命令を送信することができる。コンピュータシステム100にローカルのモデムは、データを電話回線上で受信し、赤外線送信機を使用して、データを赤外線信号に変換することができる。バス102に結合された赤外線検出器は、赤外線信号で搬送されるデータを受信し、データをバス102上に配置することができる。バス102は、データをメモリ106に搬送し、そこから、プロセッサ104は、命令を読み出し、実行する。メモリ106によって受信された命令は、随意に、プロセッサ104による実行の前後に、記憶デバイス110上に記憶され得る。

【0016】

種々の実施形態による、方法を行うためにプロセッサによって実行されるように構成される命令は、コンピュータ読み取り可能な媒体上に記憶される。コンピュータ読み取り可能な媒体は、デジタル情報を記憶するデバイスであることができる。例えば、コンピュータ読み取り可能な媒体は、ソフトウェアを記憶するために、当技術分野において周知のように、コンパクトディスク読取専用メモリ（CD-ROM）を含む。コンピュータ読み取り可能な媒体は、実行されるように構成される命令を実行するために好適なプロセッサによってアクセスされる。

【0017】

本教示の種々の実装の以下の説明は、例証および説明の目的のために提示される。包括的でもなく、本教示を開示される精密な形態に制限するものでもない。修正および変形例は、前述の教示に照らして可能である、または本教示の実践から取得され得る。加えて、説明される実装は、ソフトウェアを含むが、本教示は、ハードウェアおよびソフトウェアの組み合わせとして、またはハードウェア単独において、実装され得る。本教示は、オブジェクト指向および非オブジェクト指向両方のプログラミングシステムによって実装され得る。

【0018】

（データ処理のシステムおよび方法）

前述のように、自動化方法が、タンデム質量分析計の質量分析器の検出器サブシステムによって生じる飽和を防止または回避するために開発された。しかしながら、そのような自動化方法は、概して、全イオンに等しく影響を及ぼすため、追加の望ましくない影響を生み出し得る。例えば、イオンビームを減衰させ、強力背景イオンの飽和を除去する、自

10

20

30

40

50

動化方法は、着目イオンからの強度の損失をもたらし得る。

【 0 0 1 9 】

典型的には、スキャンは、ある質量範囲にわたって、均一質量選択窓において生じる。しかしながら、質量分析ハードウェアにおける近年の発展は、ある質量範囲にわたって、単一値の代わりに、タンデム質量分析計の質量選択窓幅が変動されること、または任意の値に設定されることを可能にした。例えば、四重極質量フィルタに印加される無線周波数 (R F) および直流 (D C) 電圧の両方の独立制御が、可変質量選択窓幅の選択を可能にすることができる。任意のタイプのタンデム質量分析計が、可変質量選択窓幅の選択を可能にすることができる。タンデム質量分析計は、2つ以上の質量分析を行う、1つ以上の物理的質量分析器を含むことができる。タンデム質量分析計の質量分析器として、飛行時間 (T O F)、四重極、イオントラップ、線形イオントラップ、オービトラップ、またはフーリエ変換質量分析計が挙げられ得るが、それらに限定されない。

10

【 0 0 2 0 】

種々の実施形態では、可変質量選択窓幅を伴うスキャンが、ある質量範囲の領域から、イオンをフィルタリングするために使用される。フル質量範囲の事前スキャンが、行われる、または以前の調査スキャンが、その質量範囲に対するフルスペクトルを生み出すために使用される。可変質量選択窓幅を伴う非重複質量選択窓が、次いで、その質量範囲から選択される。これらの質量選択窓は、イオンがスキャンされ、バンドパススペクトルに追加されることを可能にするか、または、イオンがスキャンされ、バンドパススペクトル内に含まれることを防止することを可能にするかのいずれかであるように選択される。

20

【 0 0 2 1 】

イオンがスキャンされ、バンドパススペクトルに追加されることを可能にするように選択される、質量選択窓は、例えば、フルスペクトルの静穏領域を含むことができる。これらの静穏領域に対する質量選択窓を選択することに加え、質量分析計に対する他の調整パラメータ値もまた、選択することができる。質量分析計に対する調整パラメータとして、最大強度または総イオン電流が挙げられ得るが、それらに限定されない。異なる調整パラメータ値が、異なる質量選択窓のスキャンに対して選択され得る。

【 0 0 2 2 】

イオンがスキャンされ、バンドパススペクトル内に含まれることを防止するように選択される質量選択窓は、フルスペクトルの飽和領域、または、例えば、以前に断片化されたイオンを含む領域を含むことができる。これらの質量選択窓内のイオンに対する強度値は、これらの質量選択窓に対してスキャンを行わないことによって、バンドパススペクトル内に含まれることを防止される。スキャンが行われないので、バンドパススペクトルは、これらの質量選択窓に対して、ゼロ強度値を含む。

30

【 0 0 2 3 】

(イオンフィルタシステム)

図 2 は、種々の実施形態による、ある質量範囲から、イオンをバンドパスフィルタリングするためのシステム 2 0 0 を示す、概略図である。システム 2 0 0 は、タンデム質量分析計 2 1 0 およびプロセッサ 2 2 0 を含む。プロセッサ 2 2 0 は、コンピュータ、マイクロプロセッサ、または制御信号およびデータを質量分析計 2 1 0 から送受信し、データを

40

【 0 0 2 4 】

タンデム質量分析計 2 1 0 は、2つ以上の質量分析を行う、1つ以上の物理的質量分析器を含むことができる。タンデム質量分析計の質量分析器として、飛行時間 (T O F)、四重極、イオントラップ、線形イオントラップ、オービトラップ、またはフーリエ変換質量分析器が挙げられ得るが、それらに限定されない。タンデム質量分析計 2 1 0 はまた、分離デバイス (図示せず) を含むことができる。分離デバイスは、液体クロマトグラフィ、ガスクロマトグラフィ、キャピラリー電気泳動、またはイオン移動度を含むが、それらに限定されない、分離技法を行うことができる。タンデム質量分析計 2 1 0 は、空間または時間それぞれにおいて、別個の質量分析段階またはステップを含むことができる。

50

【 0 0 2 5 】

タンデム質量分析計 2 1 0 は、質量分析器を含み、異なる調整パラメータ値が、異なる質量選択窓幅でスキャンを行うために使用されることができる。タンデム質量分析計 2 1 0 は、ある質量範囲のフルスキャンを行う。質量範囲は、例えば、試料の好ましい質量範囲または試料の質量範囲全体を含むことができる。フルスキャンは、事前スキャンまたは以前の調査スキャンを含むことができるが、それらに限定されない。

【 0 0 2 6 】

プロセッサ 2 2 0 は、タンデム質量分析計 2 1 0 と通信する。プロセッサ 2 2 0 は、タンデム質量分析計 2 1 0 から、フルスキャンに対するフルスペクトルを受信する。プロセッサ 2 2 0 は、第 1 のフルスペクトルの質量選択窓を選択し、第 1 の組の調整パラメータ値を選択する。プロセッサ 2 2 0 は、タンデム質量分析計 2 1 0 に、第 1 の組の調整パラメータ値が、第 1 の質量選択窓の第 1 のスキャンを行うように命令するために使用されることができる。プロセッサ 2 2 0 は、タンデム質量分析計 2 1 0 から、第 1 のスキャンに対する第 1 のスペクトルを受信する。最後に、プロセッサ 2 2 0 は、その質量範囲の第 1 の質量選択窓に対する第 1 のスペクトルからの値を含む、その質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルを生成する。

【 0 0 2 7 】

種々の実施形態では、システム 2 0 0 は、質量範囲にわたって、2 つ以上の質量選択窓から、イオンをバンドパスフィルタリングするために使用されることができる。例えば、プロセッサ 2 2 0 はさらに、フルスペクトルの 1 つ以上の追加の質量選択窓を選択し、1 つ以上の追加の組の調整パラメータ値を選択する。第 1 の質量選択窓および 1 つ以上の追加の質量選択窓は、フルスペクトル内で重複しない。プロセッサ 2 2 0 は、タンデム質量分析計に、1 つ以上の追加の組の調整パラメータ値が、1 つ以上の追加の質量選択窓の 1 つ以上のスキャンを行うように命令するために使用されることができる。プロセッサ 2 2 0 は、タンデム質量分析計から、1 つ以上のスキャンに対する 1 つ以上のスペクトルを受信する。プロセッサ 2 2 0 は、バンドパスフィルタリングされたスペクトルに、質量範囲の 1 つ以上の追加の質量選択窓に対する 1 つ以上のスペクトルからの値を追加する。

【 0 0 2 8 】

種々の実施形態では、システム 2 0 0 は、2 つのバンドパス質量選択窓間の質量選択窓から、イオンを取り除くために使用されることができる。例えば、プロセッサ 2 2 0 はさらに、フルスペクトルの第 2 の質量選択窓を選択し、第 2 の組の調整パラメータ値を選択する。第 1 の質量選択窓および第 2 の質量選択窓は、フルスペクトル内で重複しない。プロセッサ 2 2 0 は、タンデム質量分析計 2 1 0 に、第 2 の組の調整パラメータ値が、第 2 の質量選択窓の第 2 のスキャンを行うように命令する。プロセッサ 2 2 0 は、タンデム質量分析計 2 1 0 から、第 2 のスキャンに対する第 2 のスペクトルを受信する。最後に、プロセッサ 2 2 0 は、バンドパスフィルタリングされたスペクトルに、質量範囲の第 2 の質量選択窓に対する第 2 のスペクトルからの値を追加する。

【 0 0 2 9 】

種々の実施形態では、質量範囲にわたる 2 つ以上の質量選択窓に対するスキャンは、異なる調整パラメータ値を含むことができる。例えば前述の、第 1 の組の調整パラメータ値および第 2 の組の調整パラメータ値は、少なくとも 1 つの値を共有しない。

【 0 0 3 0 】

プロセッサ 2 2 0 はさらに、第 1 の質量選択窓と第 2 の質量選択窓との間のフルスペクトルの第 3 の質量選択窓を選択する。第 3 の質量選択窓は、例えば、高強度イオン、高いイオン計数率、または以前に断片化されたイオンのリストからのイオンを含むことができる。プロセッサ 2 2 0 は、バンドパスフィルタリングされたスペクトルに、質量範囲の第 3 の質量選択窓に対するゼロ値を追加する。第 1 の質量選択窓、第 2 の質量選択窓、および第 3 の質量選択窓は、例えば、同一の幅を有していない。

【 0 0 3 1 】

(イオンフィルタ方法)

10

20

30

40

50

図3は、種々の実施形態による、ある質量範囲から、イオンをバンドパスフィルタリングする方法300を示す、例示的流れ図である。

【0032】

方法300のステップ310では、フルスペクトルが、タンデム質量分析計を使用する、ある質量範囲のフルスキャンに対して受信される。タンデム質量分析計は、質量分析器を含み、異なる調整パラメータ値を使用して、異なる質量選択窓幅でスキャンを行うことができる。

【0033】

ステップ320では、第1のフルスペクトルの質量選択窓が、選択され、第1の組の調整パラメータ値が、選択される。

【0034】

ステップ330では、タンデム質量分析計は、第1の組の調整パラメータ値を使用して、第1の質量選択窓の第1のスキャンを行うように命令される。

【0035】

ステップ340では、第1のスペクトルが、タンデム質量分析計から、第1のスキャンに対して受信される。

【0036】

ステップ350では、その質量範囲の第1の質量選択窓に対する第1のスペクトルからの値を含む、バンドパスフィルタリングされたスペクトルが、その質量範囲に対して生成される。

【0037】

(イオンフィルタコンピュータプログラム製品)

種々の実施形態では、コンピュータプログラム製品は、有形のコンピュータ読み取り可能な記憶媒体を含み、そのコンテンツは、ある質量範囲から、イオンをバンドパスフィルタリングする方法を行うように、プロセッサ上で実行される命令を伴うプログラムを含む。本方法は、1つ以上の個別のソフトウェアモジュールを含む、システムによって行われる。

【0038】

図4は、種々の実施形態による、ある質量範囲から、イオンをバンドパスフィルタリングする方法を行う、1つ以上の個別のソフトウェアモジュールを含む、システム400の概略図である。システム400は、測定モジュール410およびフィルタリングモジュール420を含む。

【0039】

測定モジュール410は、タンデム質量分析計を使用する、ある質量範囲のフルスキャンに対するフルスペクトルを受信する。タンデム質量分析計は、質量分析器を含み、異なる調整パラメータ値を使用して、異なる質量選択窓幅でスキャンを行うことができる。フィルタリングモジュール420は、第1のフルスペクトルの質量選択窓を選択し、第1の組の調整パラメータ値を選択する。測定モジュール410は、タンデム質量分析計に、第1の組の調整パラメータ値を使用して、第1の質量選択窓の第1のスキャンを行うように命令する。測定モジュール410は、タンデム質量分析計から、第1のスキャンに対する第1のスペクトルを受信する。フィルタリングモジュール420は、その質量範囲の第1の質量選択窓に対する第1のスペクトルからの値を含む、その質量範囲に対するバンドパスフィルタリングされたスペクトルを生成する。

【0040】

本教示は、種々の実施形態と併せて説明されるが、本教示が、そのような実施形態に制限されることを意図するものではない。対照的に、本教示は、当業者によって理解されるように、種々の代替、修正、および均等物を包含する。

【0041】

さらに、種々の実施形態の説明において、本明細書は、ステップの特定のシーケンスとして、方法および/またはプロセスを提示し得る。しかしながら、方法またはプロセスが

10

20

30

40

50

本明細書に記載されるステップの特定の順序に依拠しない程度において、方法またはプロセスは、説明されるステップの特定のシーケンスに制限されるべきではない。当業者が理解するであろうように、ステップの他のシーケンスも可能であり得る。したがって、本明細書に記載されるステップの特定の順序は、請求項に関する制限として解釈されるべきでない。加えて、方法および/またはプロセスを対象とする請求項は、そのステップの実施を書かれた順序に制限されるべきではなく、当業者は、シーケンスが、変動され得、依然として、種々の実施形態の精神および範囲内にあることを容易に理解することができる。

【図2】

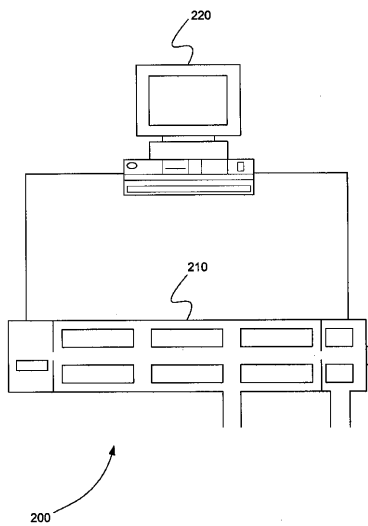


FIG. 2

【図1】

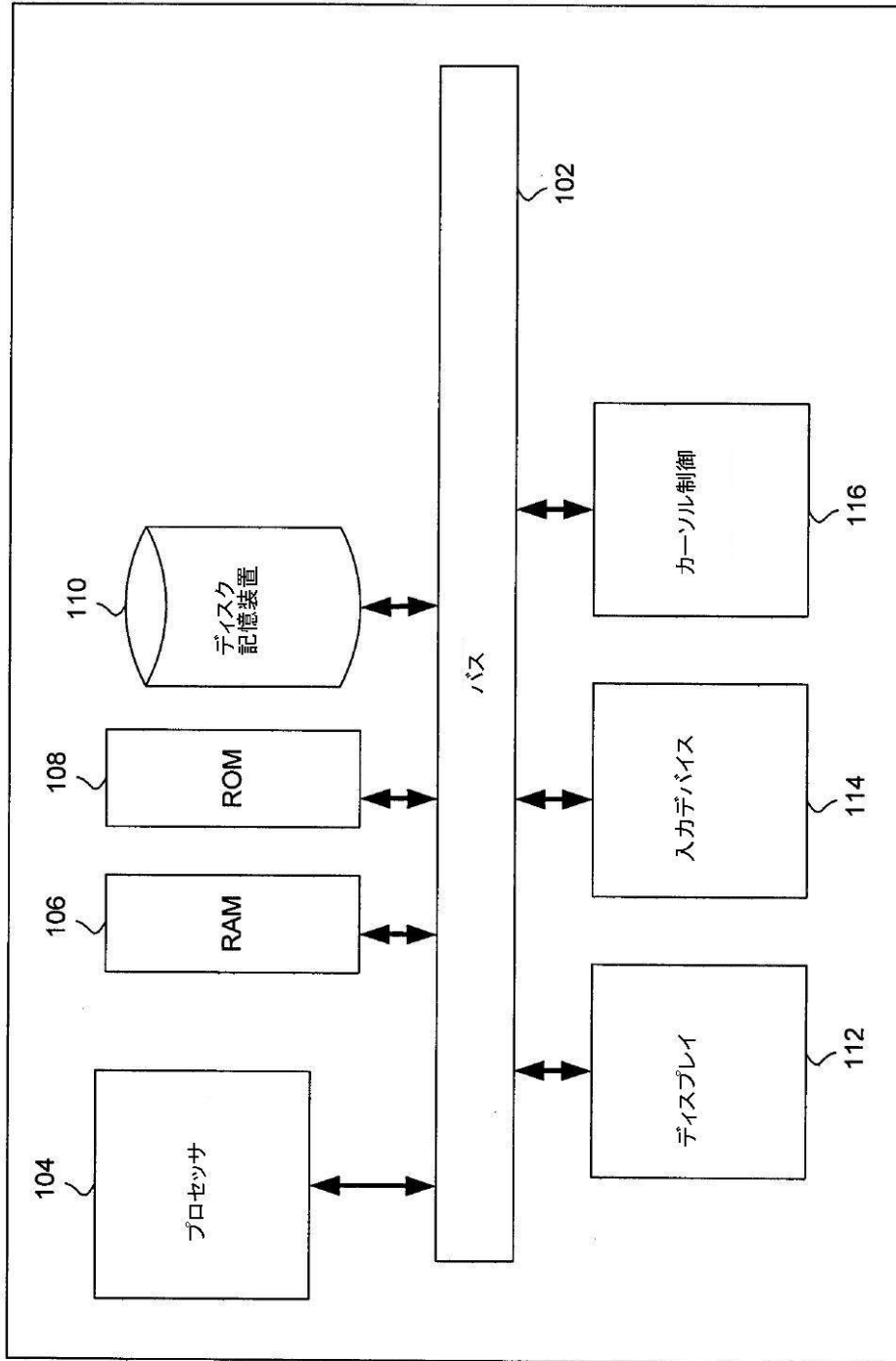


FIG. 1

100

【図3】

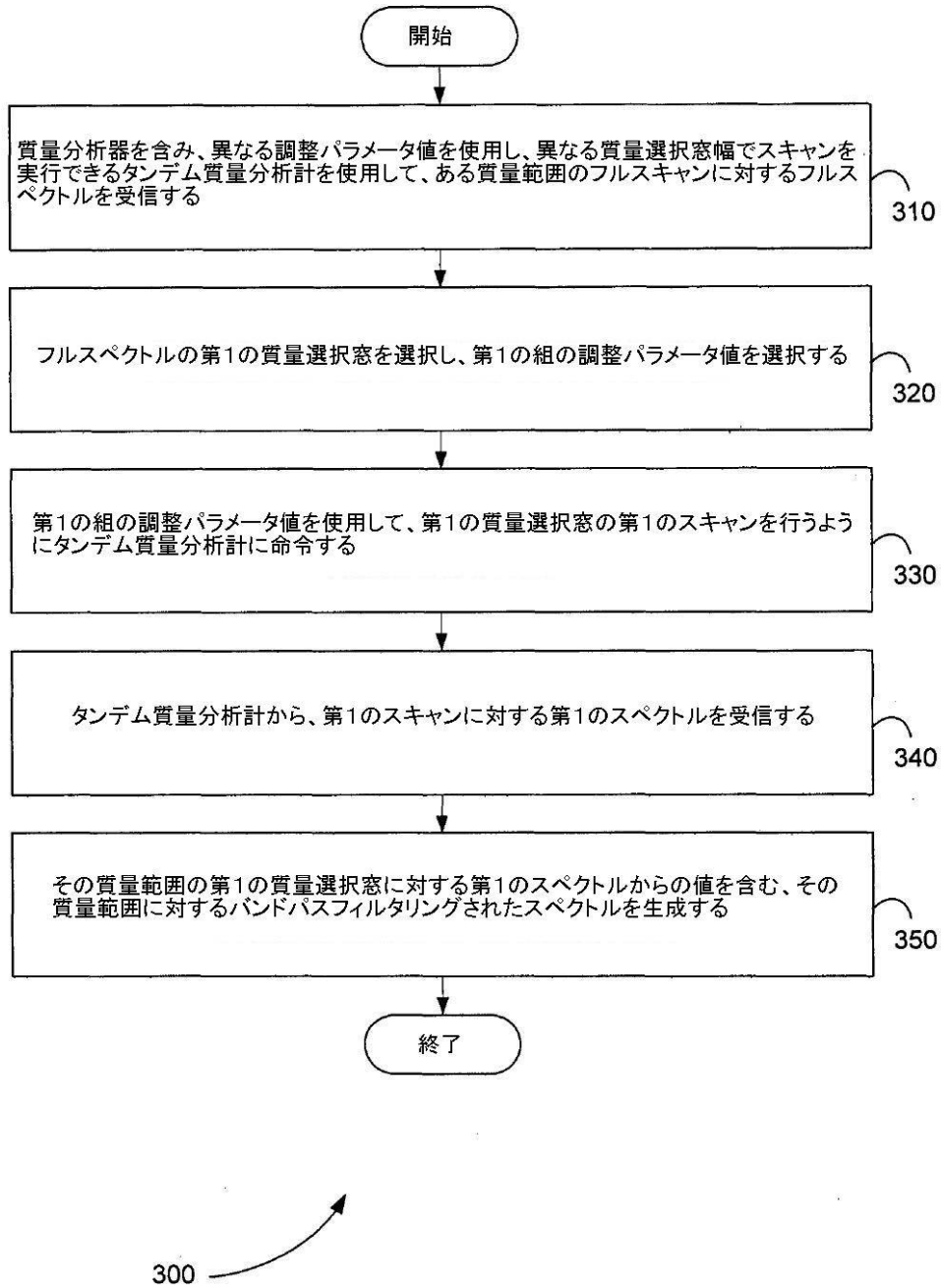


FIG. 3

【 図 4 】

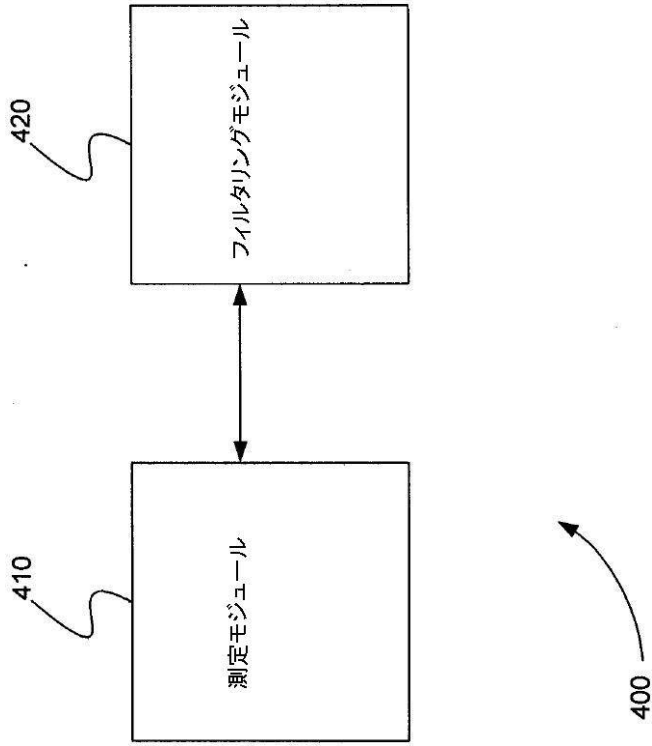


FIG. 4

フロントページの続き

(72)発明者 ブルームフィールド, ニック ジー.
カナダ国 エル3ケー 2ケー4 オンタリオ, ニューマーケット, オースティンポール ド
ライブ 184

審査官 桐畑 幸 廣

(56)参考文献 特開2005-221276(JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
H01J 49/42
G01N 27/62