

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第5568994号
(P5568994)

(45) 発行日 平成26年8月13日(2014.8.13)

(24) 登録日 平成26年7月4日(2014.7.4)

(51) Int.Cl.

GO1N 30/86 (2006.01)

F 1

GO1N 30/86 R
GO1N 30/86 D
GO1N 30/86 G
GO1N 30/86 V

請求項の数 9 (全 11 頁)

(21) 出願番号 特願2010-2630 (P2010-2630)
 (22) 出願日 平成22年1月8日 (2010.1.8)
 (65) 公開番号 特開2011-141220 (P2011-141220A)
 (43) 公開日 平成23年7月21日 (2011.7.21)
 審査請求日 平成24年5月29日 (2012.5.29)

(73) 特許権者 000001993
 株式会社島津製作所
 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地
 (74) 代理人 110001069
 特許業務法人京都国際特許事務所
 (72) 発明者 塩浜 徹
 京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式会社島津製作所内
 審査官 赤坂 英樹

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】分析装置制御システム及び該システム用プログラム

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

測定対象試料をクロマトグラフによって時間的に分離しつつ、全測定時間内の一又は複数の部分時間範囲のそれぞれにおいて、予め決められた測定条件が設定された一又は複数の測定を1回ずつ実行する単測定の繰り返しから成る所定の測定を実行するように分析装置を制御するためのシステムであって、

a) 前記予め決められた測定条件が設定された一又は複数の測定を実行する一又は複数の時間範囲をそれぞれ範囲バーとして表示する時間範囲表示部と、

b) 前記各部分時間範囲においてループタイム(単測定に要する時間)を算出し、該算出結果を表示するループタイム表示部と、

を備えることを特徴とする分析装置制御システム。

【請求項2】

前記ループタイム表示部が、ループタイムの変化を時間的に示すように前記算出結果を一覧表示する

ことを特徴とする請求項1に記載の分析装置制御システム。

【請求項3】

予め用意されている、前記測定対象試料に対応する参照用クロマトグラムを表示するクロマトグラム表示部

を更に備え、

前記時間範囲表示部が、前記クロマトグラム表示部によって表示されている参照用クロ

10

20

マトグラムに対し、範囲バーを時間的に重畠して表示することを特徴とする請求項 1 又は 2 に記載の分析装置制御システム。

【請求項 4】

前記ループタイム表示部が、更に、複数の測定が時間的に重なっている時間範囲を検出し、その重なりの数を前記算出結果に含めて一覧表示することを特徴とする請求項 1 ~ 3 のいずれかに記載の分析装置制御システム。

【請求項 5】

前記ループタイムと予め設定された値とを比較し、該ループタイムが該値を超えている場合に、警告表示を行うループタイム警告部を更に備えることを特徴とする請求項 1 ~ 4 のいずれかに記載の分析装置制御システム

10

。

【請求項 6】

前記表示されている算出結果に対してループタイムの時間範囲が指定されたことに基づき、該指定された時間範囲を前記参照用クロマトグラム上に表示されている範囲バーに重畠して表示する指定時間範囲提示部

を更に備えることを特徴とする請求項 1 ~ 5 のいずれかに記載の分析装置制御システム

。

【請求項 7】

前記指定時間範囲提示部が、更に、前記指定されたループタイムの時間範囲に存在する複数の範囲バーが互いに近接するように範囲バーの並び替えを行う

20

ことを特徴とする請求項 6 に記載の分析装置制御システム。

【請求項 8】

ユーザによる指示に基づき、前記時間範囲表示部によって表示されている範囲バーの時間的位置及び / 又は長さを変更する範囲変更部と、

前記範囲変更部によって範囲バーの時間的位置及び / 又は長さが変更されたことに基づき、該範囲バーに対応する測定の時間範囲を再設定する測定時間再設定部と、
を更に備え、

前記ループタイム表示部が、前記範囲変更部によって範囲バーの時間的位置及び / 又は長さが変更されたことに基づき、前記各時間範囲に関するループタイムを再算出する

ことを特徴とする請求項 1 ~ 7 のいずれかに記載の分析装置制御システム。

30

【請求項 9】

測定対象試料をクロマトグラフによって時間的に分離しつつ、全測定時間内の一又は複数の部分時間範囲のそれれにおいて、予め決められた測定条件が設定された一又は複数の測定を1回ずつ実行する単測定の繰り返しから成る所定の測定を実行するように分析装置を制御するためのシステム用のプログラムであって、該プログラムを実行するコンピュータを、

a)前記予め決められた測定条件が設定された一又は複数の測定を実行する一又は複数の時間範囲をそれぞれ範囲バーとして表示する時間範囲表示部、

b)前記各部分時間範囲においてループタイム(単測定に要する時間)を算出し、該算出結果を表示するループタイム表示部、

40

として動作させることを特徴とする分析装置制御システム用プログラム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、分析装置を制御するためのシステム及び該システム用プログラムに関する。特に本発明は、クロマトグラフを含む、又はクロマトグラフと接続された分析装置の測定条件を設定するための制御システム及びプログラムに関する。

【背景技術】

【0002】

クロマトグラフと質量分析器とが組み合わされたクロマトグラフ質量分析装置では、前

50

段のクロマトグラフにおいて時間的に分離された試料を後段の質量分析器へ連続的に導入し、質量分析を行う（例えば特許文献1参照）。

後段の質量分析器では、時間的に分離されて導入されてくる試料全体を対象として同一の測定を実行するのではなく、ピークが存在している個所など、クロマトグラムに変化がみられる個所のみを対象として、即ち一又は複数の時間範囲のみを対象として、それぞれ所定の測定を実行するのが普通である。

【0003】

そのため、所望の分析を実行するためには、同一試料に関する過去のクロマトグラムを用意しておき、ユーザがこの参照用クロマトグラムを参照しつつ、どの測定をどの時間に実行するかを設定するという測定の時間範囲の設定作業が必要となる。

10

【0004】

この時間範囲の設定作業は分析装置を制御するための制御用アプリケーション上で行われるが、これは従来、ユーザが参照用クロマトグラムを参照しつつ、所定の入力欄に時間を示す数字を入力することで行っていた。このような従来の分析装置制御用アプリケーションの画面例を図8に示す。ここでは、画面左欄において、クロマトグラフ測定時間が「セグメント1」=[0.000 - 10.000](分)、「セグメント2」=[10.000 - 20.000](分)と分割され、「セグメント1」において「イベント1」と及び「イベント2」という測定が、「セグメント2」において「イベント1」という測定が手動で入力された例が示されている。

なお以下では、所定の時間範囲内において行われる複数の測定のうち一定の測定条件で行う測定のことを「イベント」と呼ぶこととする。

20

【0005】

しかしながら、このような従来のクロマトグラフ質量分析装置において質量分析器の測定条件を設定する際には、ある測定条件に対応する測定の時間範囲を手動で指定する必要があったため、作業が繁雑になりやすく、また、入力ミスが生じるおそれもあった。そこで本願発明者は、ユーザがより直観的また簡潔に測定条件を設定することができる分析装置制御システムを提供することを目的とした発明を既に行い、本願発明に先立って出願を行っている（特願2009-209835）。このシステムでは、図9に示すようなグラフィカルユーザインターフェースが提供され、以下のような効果が得られる。

【0006】

30

測定の時間範囲がそれぞれ、範囲バーとして参照用クロマトグラム上に時間的に重畳されて表示部（モニタ）上に表示される。従って、ユーザは参照用クロマトグラムと、実行される測定との関係を一目で理解することができる。また、一つの試料に対して複数の測定を実行する場合には、それら複数の測定同士の関係も視覚的に即座に理解される。よって、測定条件の設定の負担が軽減されるとともに、設定ミスを防ぐことができる。

さらに、マウスなどの入力部を操作することでユーザが表示部上に表示されている範囲バーの長さを調節したり時間的位置を変更したりするだけで、当該測定を実行する時間範囲を変更することができ、高い自由度で以て時間範囲を設定できるとともに、時間範囲を手動で入力する場合と比べて操作性が高く、設定ミスの減少も期待できる。

【先行技術文献】

40

【特許文献】

【0007】

【特許文献1】特開2005-083952号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0008】

クロマトグラフ質量分析装置などの分析装置では一般的に、指定された時間範囲内において設定された各イベントは、ノイズの除去等を目的として複数回（通常は少なくとも10回以上）の測定が繰り返し実行される。この際、同一の時間に実行されるイベントの数が1であれば、例えば該イベントの1回目の測定が終了した後に同イベントの2回目の測定

50

が開始されることになる。しかしながらイベントの数が複数であると、全てのイベントが一連の測定を終了した後に、次の一連の測定が開始されることになる。すなわち、イベントの数が複数である場合、全てのイベントが一連の測定を終了するまでが「1回分の測定」となる。

以下、指定された時間範囲内において設定された一又は複数のイベントが行う1回分の測定のことを「単測定」と呼び、一つの単測定に要する時間を「ループタイム」と呼ぶことにする。

【0009】

このループタイムは「イベント毎の測定時間の総和」と「検出器の切替などにかかる時間」の和となる。従って、同一の時間に実行されるイベントが多数重なってしまうとループタイムが長くなり、場合によっては設定した時間範囲を超えてしまい、正確な測定を実行することができない（測定結果の信頼性が低下したり、測定自体が行えなかったりする）という問題が生じ得る。

以上から、測定条件を設定する際には、ループタイムが過度に長くならないように、イベントの重なりが少なくなるように調整することが必要となる。しかし、従来、このループタイムを知るためにはユーザ自身が計算を行わねばならず、非常に手間が掛かるという問題があった。

【0010】

本発明は、以上のような課題を解決するためになされたものである。

【課題を解決するための手段】

【0011】

上記課題を解決するために成された分析装置制御システムは、

測定対象試料をクロマトグラフによって時間的に分離しつつ、全測定時間内の一又は複数の部分時間範囲のそれぞれにおいて、予め決められた測定条件が設定された一又は複数の測定を1回ずつ実行する単測定の繰り返しから成る所定の測定を実行するように分析装置を制御するためのシステムであって、

a)前記予め決められた測定条件が設定された一又は複数の測定を実行する一又は複数の時間範囲をそれぞれ範囲バーとして表示する時間範囲表示部と、

b)前記各部分時間範囲においてループタイム（単測定に要する時間）を算出し、該算出結果を表示するループタイム表示部と、

を備えることを特徴としている。

【0012】

また、本発明に係る分析装置制御システムは、好ましくは、

予め用意されている、前記測定対象試料に対応する参照用クロマトグラムを表示するクロマトグラム表示部

を更に備え、

前記時間範囲表示部が、前記クロマトグラム表示部によって表示されている参照用クロマトグラムに対し、範囲バーを時間的に重畳して表示する

ようになると良い。

ここで、「時間的に重畳」とは、クロマトグラムと範囲バーとが画面上で直接重なり合う場合の他、強度軸方向に分離しつつも、時間軸方向では両者が対応する時間範囲において重なっている場合のことをいう。

【0013】

さらに本発明は、

測定対象試料をクロマトグラフによって時間的に分離しつつ、全測定時間内の一又は複数の部分時間範囲のそれぞれにおいて、予め決められた測定条件が設定された一又は複数の測定を1回ずつ実行する単測定の繰り返しから成る所定の測定を実行するように分析装置を制御するためのシステム用のプログラムであって、該プログラムを実行するコンピュータを、

a)前記予め決められた測定条件が設定された一又は複数の測定を実行する一又は複数の

10

20

30

40

50

時間範囲をそれぞれ範囲バーとして表示する時間範囲表示部、

b)前記各部分時間範囲においてループタイム(単測定に要する時間)を算出し、該算出結果を表示するループタイム表示部、

として動作させる分析装置制御プログラムを提供する。

【0014】

本発明に係る分析装置制御システムが制御対象とする装置は、例えば液体クロマトグラフ質量分析装置のような、クロマトグラフにおいて時間的に分離された試料を対象として分析や測定を行う装置であれば、いかなるものでも構わない。

【発明の効果】

【0015】

本発明に係る分析装置制御システムによれば、クロマトグラフにより分離される測定対象試料に対して測定を行う際の測定条件を設定する際に、各部分時間範囲においてループタイムが算出され表示される。従って、ユーザはその算出結果を確認することでループタイムが不適切な値になつてないかどうかを知ることができ、調整が必要な場合には、複数のイベントの重なりが適切となるように測定条件等を再設定することができる。

【図面の簡単な説明】

【0016】

【図1】本発明に係る分析装置制御システムの一実施形態の概略構成を示す図。

【図2】測定条件設定画面の例。

【図3】測定条件設定画面の他の例。

【図4】ループタイム算出結果ウィンドウの例。

【図5】指定時間範囲提示部の動作の一例を模式的に示す図。

【図6】指定時間範囲提示部の動作の他の例を模式的に示す図。

【図7】範囲変更部の動作の一例を模式的に示す図。

【図8】従来の分析装置制御用アプリケーションの画面例。

【図9】従来の分析装置制御用アプリケーションの画面例。

【発明を実施するための形態】

【0017】

以下、本発明に係る分析装置制御システムの実施形態の例を図面を参照しつつ詳細に説明する。

【0018】

図1に、本発明に係る分析装置制御システム1の一実施形態を示す。分析装置制御システム1の実態はコンピュータであり、中央演算処理装置であるCPU(Central Processing Unit)10にメモリ12、LCD(Liquid Crystal Display)等から成るモニタ(表示部)14、キーボードやマウス等から成る入力部16、ハードディスク等の大容量記憶装置から成る記憶部20が互いに接続されている。記憶部20には分析装置制御システム用プログラム21、参照用クロマトグラム記憶部22が設けられている。記憶部20にはまた、OS(Operating System)23が記憶されている。

【0019】

本実施形態に係る分析装置制御システム1は、外部装置との直接的な接続や、外部装置等とのLAN(Local Area Network)などのネットワークを介した接続を司るためのインターフェース(I/F)18を備えており、該I/F18よりネットワークケーブルNWを介してクロマトグラフ質量分析装置である分析装置A1に接続されている。なお、本発明に係る分析装置制御システムは、I/F18を介して外部に設けられた分析装置と接続される形態に限られる必要はなく、分析装置と一体化されていても構わない。

【0020】

また、本実施形態に係る分析装置制御システム1では、OS23と分析装置制御システム用プログラム21とを別体としているが、分析装置制御システム用プログラム21がOS23の一部に組み込まれていたとしても、勿論構わない。

【0021】

10

20

30

40

50

図1においては、分析装置制御システム用プログラム21に係るよう、時間範囲表示部31、ループタイム表示部32、クロマトグラム表示部33、ループタイム警告部34、指定時間範囲提示部35、範囲変更部36、測定時間再設定部37が、それぞれ示されている。これはいずれも基本的にはCPU10が分析装置制御システム用プログラム21を実行することによりソフトウェア的に実現される。

【0022】

次に、本実施形態に係る分析装置制御システム1の動作について説明する。まず、ユーザが入力部16を適宜操作する（例えばモニタ14上に表示されているアイコンをダブルクリックする）ことにより分析装置制御システム用プログラム21の実行を命令し、分析装置A1を構成する質量分析器における測定条件の設定用画面をモニタ14に表示させる。このような測定条件設定画面4の例を図2に示す。測定条件設定画面4には、測定追加ボタン領域40、測定時間範囲表示領域41、測定条件名表示領域42などが含まれている。

10

【0023】

時間範囲表示部31、ループタイム表示部32、クロマトグラム表示部33、ループタイム警告部34、指定時間範囲提示部35、範囲変更部36、測定時間再設定部37の各部は、それぞれ以下に説明するような動作を行う。

【0024】

まず、ユーザが、図2に示す測定条件設定画面4において、例えば測定追加ボタン領域40に配置されているボタンを押下すること等により、実行する測定を入力してゆくと、その都度、時間範囲表示部31は、測定時間範囲表示領域41に、各測定の時間範囲を視覚的に示す範囲バーとして、互いに重なり合わないようにずらしつつ表示する。図2に示す例では、測定番号1～7の合計7つの測定が入力されており、各測定が実行される時間範囲が、測定時間範囲表示領域41に範囲バーとして表示されている。このとき、ユーザは各測定に関するパラメータなどの詳細な設定も行う。例えば、測定条件設定画面4の一部に、測定に関する詳細な測定条件を示し、またユーザにそれら測定条件の変更を許可するための測定条件設定領域を表示し（図示せず）、該領域内での詳細な設定をユーザに許可する。

20

【0025】

なお、測定条件設定画面4上でイベント（測定）の設定を行う際に、ユーザによる指示等に基づき、測定対象となる試料が設定されると、クロマトグラム表示部33は参照用クロマトグラム記憶部22に予め記憶されている参照用クロマトグラムのうち、試料に適した参照用クロマトグラムのデータを読み出し、これを測定条件設定画面4の測定時間範囲表示領域41に表示する（図3）。もちろん、ユーザが直接、所望する参照用クロマトグラムを選択するようにしてもよい。

30

この場合、測定時間範囲表示領域41には、参照用クロマトグラムの全体が表示されるのが好ましい。しかし、横軸方向（即ち時間方向）に参照用クロマトグラムが長い場合や、参照用クロマトグラムの或る部分を拡大表示しているような場合においては、参照用クロマトグラムの一部しか測定時間範囲表示領域41内に表示されないことがあり得る。このような場合には、ユーザによってスクロールの指示が入力されたこと（例えば右方向スクロールを指示するボタンが押下される）等に基づき、クロマトグラム表示部33は、測定時間範囲表示領域41内における参照用クロマトグラムの表示位置を適宜変更する。

40

【0026】

図2又は図3に示す測定条件設定画面4において、ユーザが入力部16を適宜操作することで「ループタイム表示」ボタン43を押下すると、ループタイム表示部32は、各測定に関して、単測定に要する時間であるループタイムを算出し、該算出結果をモニタ14の所定の箇所に（例えば測定条件設定画面4に重ねて）表示する。図4に、この算出結果を一覧表示するためのループタイム算出結果ウィンドウ5の例を示す。

【0027】

図4に示すループタイム算出結果ウィンドウ5では、ループタイム表示部32の処理の

50

結果としてループタイムが一覧表示されている。ここでは、各開始 - 終了時間（部分時間範囲）においてループタイムが5, - (無し), 15, -, 25, 60, 140, 160, 45(sec)と変化してゆくことが示されている。また、ループタイム算出結果ウィンドウ5には、ループタイム表示部32の処理の結果として、各部分時間範囲におけるイベントの重なりの数が示されている。

【0028】

また、ループタイム表示ボタン43が押下されたことに基づき、ループタイム警告部34は、まず、前記ループタイム表示部32が算出する各ループタイムを、予め設定された値と比較する。この「予め設定された値」とは、予め設定された実際の値でも良いし、測定に対して設定された時間範囲の長さに基づいて定められる値（例えば、時間範囲の長さ自体）であっても良い。この比較の結果、ループタイムの値が予め設定された値を超えていた場合には、ループタイム警告部34は、ループタイム算出結果ウィンドウ5において警告表示を行う。図4の例では、ループタイムが140sec及び160secである表示箇所を例えば赤色などの別色で強調表示している。これによって、ループタイムが不適切であると思われる箇所がユーザに対して視覚的に通知される。

10

【0029】

ループタイム算出結果ウィンドウ5上でユーザが入力部16を適宜操作し、ループタイムの時間範囲を指定する（例えば、マウスポインタ51を操作し、表示されているループタイム、開始 終了時間、イベント数のいずれかの上でクリック操作する）と、指定時間範囲提示部35は、指定された時間範囲を測定時間範囲表示領域41上に表示されている範囲バーに重畳して表示する。図5に示す例では、ループタイムが「140」である時間範囲が指定されたことに基づき、測定時間範囲表示領域41内の測定番号3～7の測定が太枠6で囲まれている。このようにして、ユーザはループタイム算出結果ウィンドウ5上に表示されているループタイムと、測定時間範囲表示領域41との関係を直観的に理解することができる。

20

【0030】

また、図6に示すように、指定時間範囲提示部35は、指定されたループタイムの時間範囲に存在する複数の範囲バーが互いに近接するように範囲バーの並び替えを行っても良い。図6の例では、ループタイムが「140」である時間範囲に含まれている、測定番号3、4、5、7のイベントに関し、測定時間範囲表示領域41に示されている範囲バー（および測定条件名表示領域42に記載されている測定名）が近接するように並び替えが行われている。これによって、とりわけイベントの数が多い場合に、時間的に重なっている測定をユーザが把握することが容易となる。

30

【0031】

範囲変更部36は、ユーザがマウスなどの入力部16を適宜操作したことに基づき、測定時間範囲表示領域41の範囲バーの長さを調整する。図7には、ドラッグ操作によって、範囲バーの位置が変更される場合の模式的な図を示す。これ以外にも、範囲バーの長さを長くする、又は短くするといった操作に対応して、範囲変更部36は対象となる範囲バーの位置や長さを、測定時間範囲表示領域41上で変更する。

40

【0032】

上述したように範囲変更部36によって或る範囲バーの位置や長さが変更されると、測定時間再設定部37は、その範囲バーに対応する測定の条件における時間範囲を再設定する。同時に、ループタイム算出結果ウィンドウ5がモニタ14上に表示されれば、ループタイム表示部32は、ループタイムと時間的に重なっているイベント数とを再算出し、最新の値をループタイム算出結果ウィンドウ5に反映させる。さらに、ループタイム警告部34も、上述したような動作を繰り返す。

【0033】

以上、本発明に係る分析装置制御システムについて実施例を用いて説明したが、上記は例に過ぎないことは明らかであり、本発明の趣旨の範囲内で適宜に変更や修正、又は追加を行っても構わない。

50

【0034】

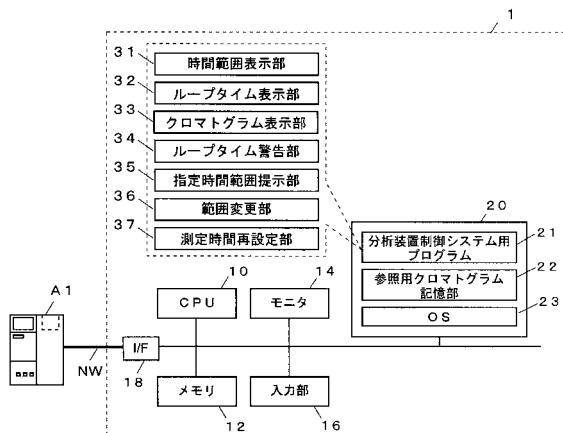
例えば、ループタイム表示部は、別ウィンドウとしてループタイム算出結果ウィンドウを開くのではなく、測定時間範囲表示領域の直上又は直下に、範囲バーと位置的に対応するようにループタイムや時間的に重なっている測定の数を表示するようにしても良い。

【符号の説明】

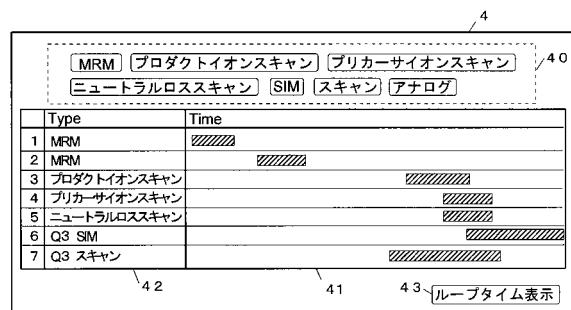
【0035】

1 ... 分析装置制御システム	
4 ... 測定条件設定画面	
5 ... ループタイム算出結果ウィンドウ	
1 0 ... C P U	10
1 2 ... メモリ	
1 4 ... モニタ	
1 6 ... 入力部	
1 8 ... I / F	
2 0 ... 記憶部	
2 1 ... 分析装置制御システム用プログラム	
2 2 ... 参照用クロマトグラム記憶部	
2 3 ... O S	
3 1 ... 時間範囲表示部	
3 2 ... ループタイム表示部	20
3 3 ... クロマトグラム表示部	
3 4 ... ループタイム警告部	
3 5 ... 指定時間範囲提示部	
3 6 ... 範囲変更部	
3 7 ... 測定時間再設定部	
4 0 ... 測定追加ボタン領域	
4 1 ... 測定時間範囲表示領域	
4 2 ... 測定条件名表示領域	
4 3 ... ループタイム表示ボタン	
5 1 ... マウスポインタ	30
A 1 ... 分析装置	

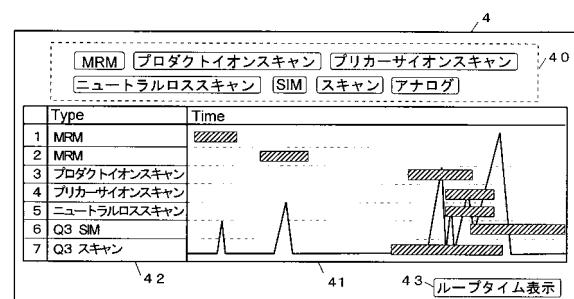
【図1】



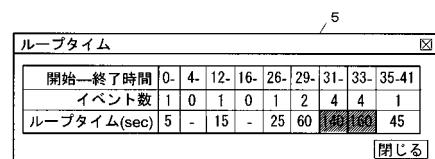
【図2】



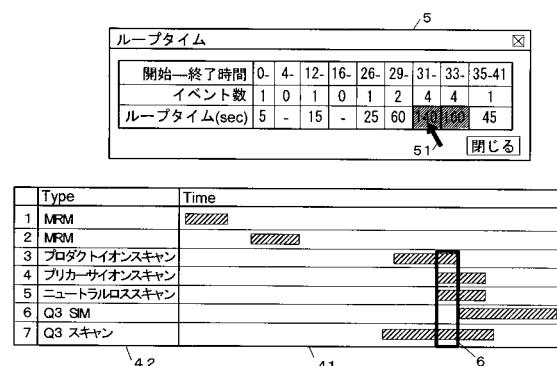
【図3】



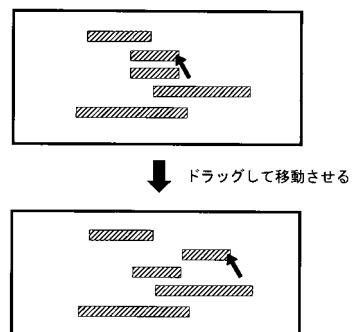
【図4】



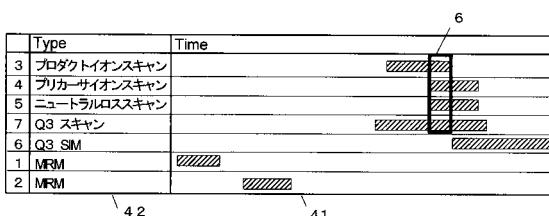
【図5】



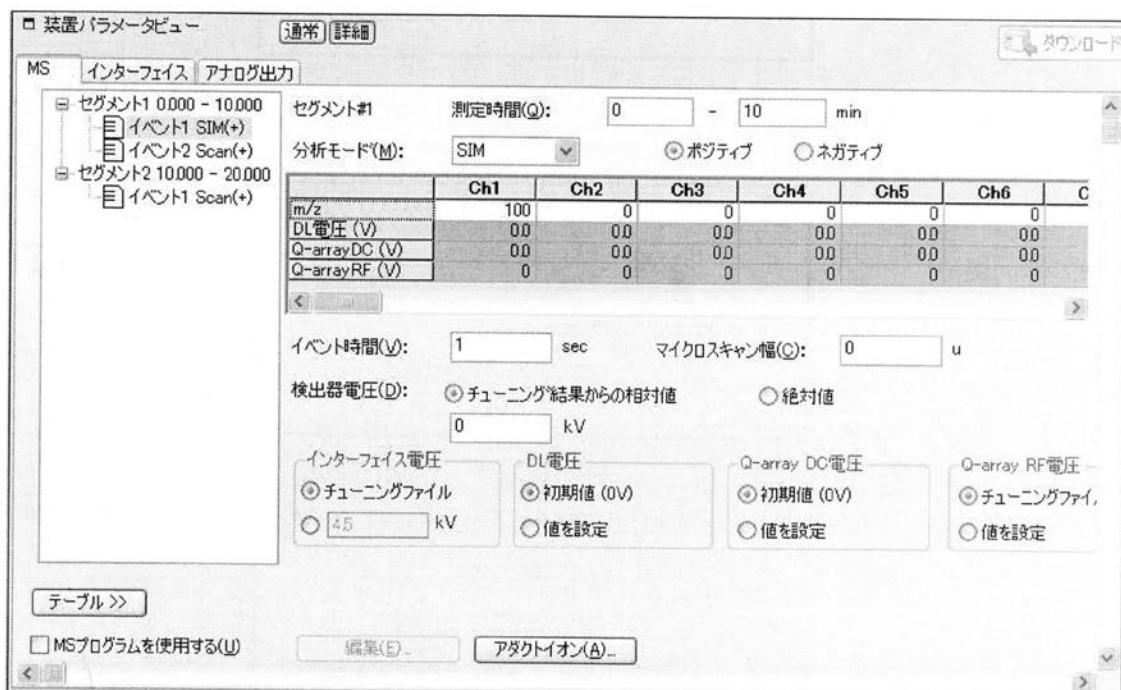
【図7】



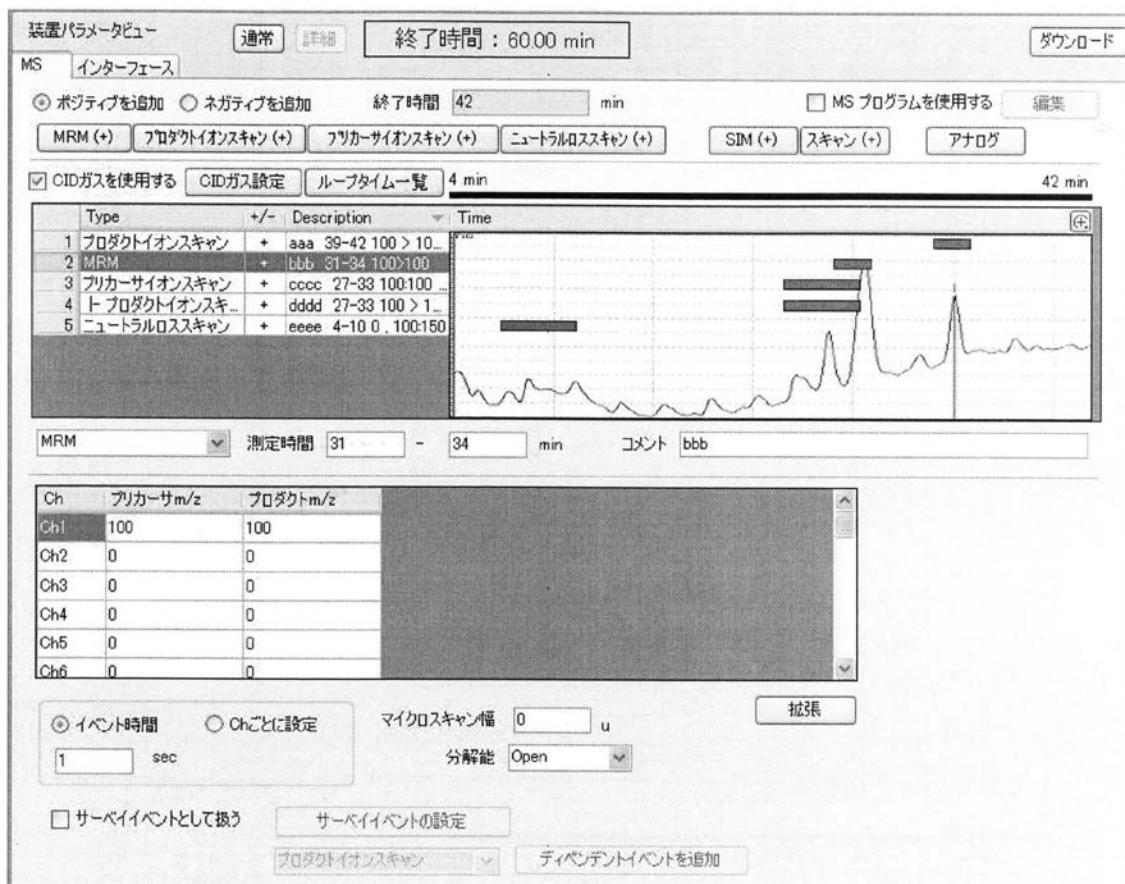
【図6】



【図8】



【図9】



フロントページの続き

(56)参考文献 特開平04-294271(JP, A)
国際公開第2007/102201(WO, A1)
特開2007-248467(JP, A)
特開2000-283970(JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)
G01N 30/00 - 30/96