(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2013년05월06일
(11) 등록번호 10-1260566
(24) 등록일자 2013년04월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01J 49/40 (2006.01) *G01N 27/62* (2006.01)
H01J 49/10 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2010-7007918
(22) 출원일자(국제) 2008년09월23일
심사청구일자 2010년06월28일
(85) 번역문제출일자 2010년04월12일
(65) 공개번호 10-2010-0083785
(43) 공개일자 2010년07월22일
(86) 국제출원번호 PCT/US2008/077365
(87) 국제공개번호 WO 2009/048739
국제공개일자 2009년04월16일
(30) 우선권주장
11/869,978 2007년10월10일 미국(US)
(뒷면에 계속)
(56) 선행기술조사문헌
US20020125423 A1*
US20070102634 A1*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
엠케이에스 인스트루먼츠, 인코포레이티드
미국, 매사추세츠 01810, 앤도버, 스위트 201, 테크 드라이브 2
(72) 발명자
로빈슨, 티모시, 로저
영국 씨떠블유5 8큐비 부랜드 스완레이 레인 톰스 카빈
애트우드, 마크
미국 캘리포니아 95014 쿠퍼티노 포지 웨이 #230 20667
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
신영무

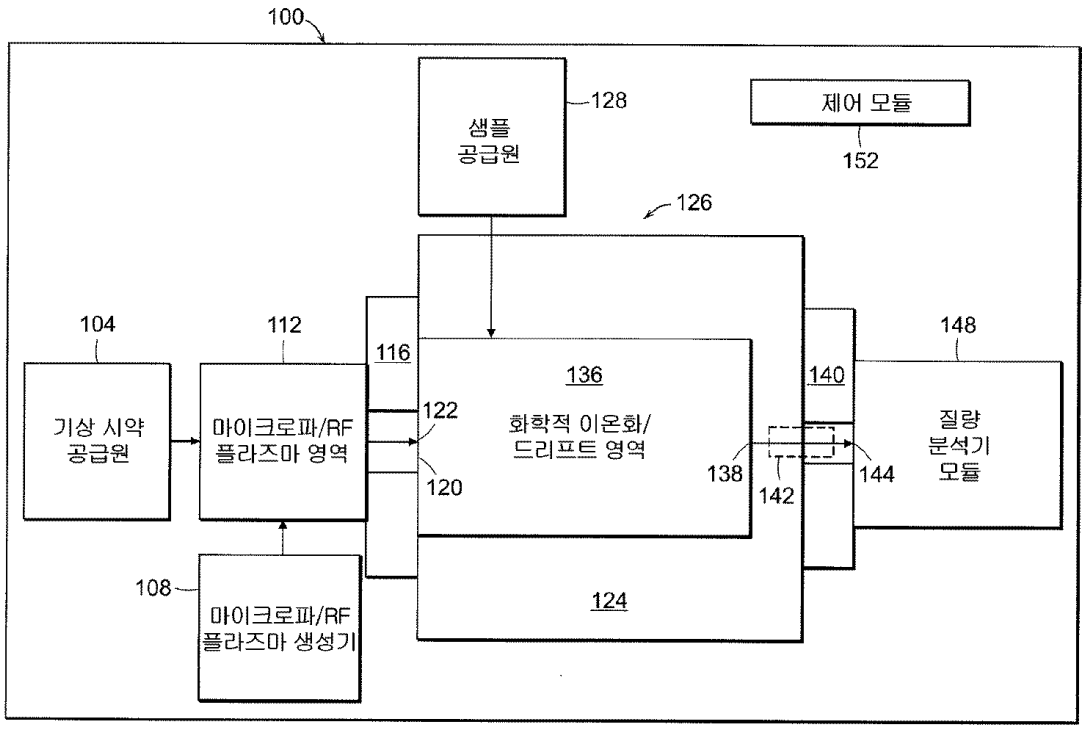
전체 청구항 수 : 총 77 항 심사관 : 양기성

(54) 발명의 명칭 **사중극 또는 비행시간형 질량 분석기를 이용한 화학적 이온화 반응 또는 양자 전이 반응 질량 분석법**

(57) 요 약

질량 분석 시스템에서 사용하기 위한 시약 이온 및 생성 이온을 생성하기 위한 시스템 및 방법을 설명한다. 미량 농도로 휘발성 유기 화합물을 검출하기 위한 시스템 및 방법에 대한 응용도 개시한다. 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원은 기상 시약의 입자들을 이온화하여 시약 이온을 형성한다. 시약 이온은 드리프트 챔버와 같은 챔버에 입력되어 유체 샘플과 상호작용한다. 전계는, 시약 이온을 제어하며, 생성 이온을 형성하도록 유체 샘플과의 상호작용을 용이하게 한다. 이어서, 시약 이온 및 생성 이온은 질량 분석기 모듈에 의한 검출을 위해 전계의 영향에 의해 챔버로부터 출력된다. 질량 분석 시스템은 시스템 파라미터들의 값들을 설정하기 위한 다양한 제어 모듈들 및 질량 분석 동안 이온 종들의 질량과 피크 강도 값들 및 시스템 내의 불량을 검출하기 위한 분석 모듈들을 포함한다.

대 표 도



(72) 발명자

첸, 싱

미국 메사추세츠 02421 렉싱톤 로링 로드 19

홀버, 윌리암, 엠.

미국 메사추세츠 01890 윈체스터 처치 스트리트 126

룽슨, 마크, 필립

영국 워터하우시즈 에스티10 3에이치지 도브 웨이 21

팔크, 조나단, 헨리

영국 샌드바츠 씨더블유11 3비제트 비캐리지 가덴스 15

사지이, 알리

미국 메사추세츠 02021 캔톤 스탠디쉬 드라이브 26

스미스, 존, 에이.

미국 메사추세츠 01845 노스 앤도버 키예스 웨이 10

(30) 우선권주장

11/869,980 2007년10월10일 미국(US)

12/026,799 2008년02월06일 미국(US)

특허청구의 범위

청구항 1

비이온화 샘플 가스를 도입하는 단계와,

기상 시약(reagent vapor)을 플라즈마 챔버에 공급하는 단계와,

일정 수의 시약 이온을 형성하기 위해 공동(cavity)으로부터 상기 플라즈마 챔버 내 상기 기상 시약에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 전송함으로써 마이크로파 또는 고주파 RF 플라즈마를 생성하는 단계와,

상기 일정 수의 시약 이온을 드리프트 챔버로 향하게 하는 단계와,

상기 드리프트 챔버에서 상기 일정 수의 시약 이온을 상기 비이온화 샘플 가스의 하나 이상의 성분과 상호작용시켜 하나 이상의 생성 이온을 생성하는 단계와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 사중극(quadrupole) 또는 비행시간형 질량 분석기 모듈로 향하게 하는 단계와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도 중 적어도 하나에 대한 값을 상기 질량 분석기 모듈에 의해 결정하는 단계

를 포함하는, 방법.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 비이온화 샘플 가스는 하나 이상의 휘발성 유기 화합물을 포함하는, 방법.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

상기 도입하는 단계는 가스 샘플 입구 포트를 밀폐 공간에 연결하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 4

제 1 항에 있어서,

상기 도입하는 단계는 비-밀폐(non-enclosed) 공간에 가스 샘플 입구 포트를 위치시키는, 방법.

청구항 5

제 1 항에 있어서,

상기 도입하는 단계는 가스 샘플 입구 포트를 컨테이너에 연결하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 6

제 1 항에 있어서,

상기 도입하는 단계는 자동차나 항공기의 배기관으로부터 하측으로 가스 샘플 입구 포트를 연결하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 7

제 1 항에 있어서,

상기 도입하는 단계는 가스 샘플 입구 포트를 음식이나 음료 제품 위의 헤드스페이스(head-space)에 연결하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 8

제 1 항에 있어서,

상기 도입하는 단계는 날숨을 수집하도록 인간의 입에 인접하게 가스 샘플 입구 포트를 위치시키는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 9

제 1 항에 있어서,

상기 도입하는 단계는 가스나 기체를 방출하는 고체 샘플 물질에 인접하게 가스 샘플 입구 포트를 위치시키는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 10

제 1 항에 있어서,

상기 도입하는 단계는 가스 샘플 입구 포트를 가스 공급원에 연결하는 단계를 포함하는, 방법.

청구항 11

마이크로파 또는 RF 에너지에 의해 플라즈마 챔버에서 기상 시약의 입자들을 이온화하여 일정 수의 시약 이온을 형성하기 위한 공동(cavity)에 배치된 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원과,

하나 이상의 휘발성 유기 화합물을 포함하는 비이온화 샘플 가스의 분석을 용이하게 하기 위한 공급원과,

상기 비이온화 샘플 가스가 드리프트 챔버에 입력되어 상기 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원으로부터 드리프트 챔버로 유도된 상기 일정 수의 시약 이온과 상호 작용하여 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 할 수 있게 하는 입구 포트를 포함하며, 전자기계가 내부에 생성되는 드리프트 챔버와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 수집하여 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도 중 적어도 하나의 값의 결정을 용이하게 하도록 상기 챔버의 출구 오리피스(orifice)에 대하여 배치되는 사중극 또는 비행시간형 질량 분석기 모듈

을 포함하는, 시스템.

청구항 12

제 11 항에 있어서,

상기 사중극 또는 비행시간형 질량 분석기 모듈은 상기 비이온화 샘플 가스의 상기 하나 이상의 휘발성 유기 화합물의 질량 또는 피크 강도 중 적어도 하나의 결정을 용이하게 하는, 시스템.

청구항 13

제 11 항에 있어서,

상기 사중극 또는 비행시간형 질량 분석기 모듈은 상기 비이온화 샘플 가스의 상기 하나 이상의 휘발성 유기 화합물의 정체(identity)의 결정을 용이하게 하는, 시스템.

청구항 14

제 11 항에 있어서,

상기 하나 이상의 휘발성 유기 화합물은, 다이옥신계 화합물, 푸란계 화합물, 클로로페놀, 나프탈렌, 벤젠, 톨루엔, 에틸벤젠, 크실렌, 넌메탄 유기 화합물, 이차 유기 에어로졸, 동중 원소 화합물, 화학 무기 작용제, 전장 가스, 화재 촉진제, 체액과 곰팡이균과 진균독의 존재를 특징으로 하는 휘발성 유기 화합물, 또는 이들의 임의의 조합을 포함하는, 시스템.

청구항 15

제 11 항에 있어서,

상기 하나 이상의 휘발성 유기 화합물은 인위개변적(anthropogenic) 또는 자연적(biogenic) 휘발성 유기 화합물

을 포함하는, 시스템.

청구항 16

질량 분석 시스템으로서,

하나 이상의 휘발성 유기 화합물을 포함하는 비이온화 샘플 가스를 도입하기 위한 수단과,

공동(cavity)으로부터 플라즈마 챔버에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 전송함으로써 상기 플라즈마 챔버 내 기상 시약 공급원으로부터 일정 수의 시약 이온을 생성하기 위한 수단과,

상기 일정 수의 시약 이온을 드리프트 챔버로 향하게 하기 위한 수단과,

상기 드리프트 챔버에서 상기 비이온화 샘플 가스를 상기 일정 수의 시약 이온과 상호 작용시켜 하나 이상의 생성 이온을 형성하기 위한 수단과,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도 중 적어도 하나의 값을 결정하도록 또는 상기 하나 이상의 휘발성 유기 화합물을 식별하도록 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 질량 분석기로 향하게 하기 위한 수단

을 포함하는, 질량 분석 시스템.

청구항 17

마이크로파 또는 RF 에너지에 의해 공동(cavity)에 적어도 부분적으로 위치된 플라즈마 챔버에서 기상 시약의 입자들을 이온화하여 일정 수의 시약 이온을 형성하기 위한 공동(cavity)에 배치된 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원과,

비이온화, 가스 샘플이 드리프트 챔버에 입력되어 상기 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원으로부터 드리프트 챔버로 유도된 상기 일정 수의 시약 이온과 상호 작용하여 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 할 수 있게 하는 입구 포트를 포함하며, 전자기계가 내부에 생성되는 드리프트 챔버와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 수집하여 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도의 값의 결정을 용이하게 하도록 상기 챔버의 출구 오리피스에 대하여 배치되는 사중극 질량 분석기 모듈

을 포함하는, 시스템.

청구항 18

제 17 항에 있어서,

상기 마이크로파 에너지원은 마이크로파 플라즈마 발생기를 포함하는, 시스템.

청구항 19

제 17 항에 있어서,

상기 고주파 RF 에너지원은 용량성 결합된 RF 플라즈마 발생기를 포함하는, 시스템.

청구항 20

제 17 항에 있어서,

상기 일정 수의 시약 이온은 히드로늄 이온, 산소 이온, 또는 아산화질소 이온을 포함하는, 시스템.

청구항 21

제 17 항에 있어서,

상기 비이온화 가스 샘플은 하나 이상의 휘발성 유기 화합물을 포함하는, 시스템.

청구항 22

제 17 항에 있어서,

상기 일정 수의 시약 이온과 상기 비이온화, 가스 샘플 간의 상호 작용을 용이하게 하고 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 상기 드리프트 챔버의 출구 오리피스를 통과시키기 위한 전자기계를 생성하도록 상기 챔버에 대하여 배치되는 전극들의 세트를 더 포함하는, 시스템.

청구항 23

제 22 항에 있어서,

상기 전극들의 세트는 상기 드리프트 챔버의 축에 대하여 방사상으로 배치되고,

상기 전자기계는 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온이 축방향으로 향하게 하는, 시스템.

청구항 24

제 22 항에 있어서,

상기 전극들의 세트와 통신하며 상기 시스템의 동작 파라미터에 기초하여 상기 드리프트 챔버 내의 전자기계의 값을 결정하도록 동작가능한 제어 모듈을 더 포함하는, 시스템.

청구항 25

제 17 항에 있어서,

상기 드리프트 챔버에 입력되는 샘플의 양을 결정하도록 질량 흐름 제어기, 모세관, 또는 누수 밸브를 더 포함하는, 시스템.

청구항 26

제 17 항에 있어서,

상기 시약 이온이 상기 드리프트 챔버 내로 선택적으로 입력될 수 있도록 상기 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원과 상기 챔버에 대하여 배치되는 질량 필터를 더 포함하는, 시스템.

청구항 27

제 26 항에 있어서,

상기 질량 필터는 사중극 질량 필터인, 시스템.

청구항 28

제 17 항에 있어서,

상기 시스템과 통신하며 상기 사중극 질량 분석기 모듈로부터의 데이터를 분석하도록 동작가능한 다변수 분석 모듈을 더 포함하는, 시스템.

청구항 29

제 17 항에 있어서,

상기 마이크로파 에너지원은,

마이크로파 발생기와,

상기 플라즈마 챔버가 공진기 내에 배치되며 상기 드리프트 챔버와 통하는, 공진기와,

기상 시약 공급원, 상기 드리프트 챔버, 또는 상기 기상 시약 공급원과 드리프트 챔버 둘 다 내부의 마이크로파 에너지의 양을 저감하도록 플라즈마 챔버가 통과하는 하나 이상의 쵸크를 포함하는, 시스템.

청구항 30

제 17 항에 있어서,

상기 시스템과 통신하며 상기 시스템의 동작 파라미터에 부분적으로 기초하여 상기 시스템의 입력 파라미터를 변경하도록 동작가능한 제어 모듈을 더 포함하는, 시스템.

청구항 31

제 30 항에 있어서,

상기 시스템의 동작 파라미터는,

비이온화, 가스 샘플의 조성, 드리프트 챔버의 압력, 상기 드리프트 챔버를 통과하는 상기 하나 이상의 생성 이온이나 상기 일정 수의 시약 이온의 속도, 상기 비이온화, 가스 샘플이나 시약 이온이 상기 드리프트 챔버 내로 향하는 유량, 상기 하나 이상의 생성 이온이나 상기 일정 수의 시약 이온의 에너지, 시약 이온과 생성 이온의 화학적 조성, 또는 이들의 임의의 조합 중 적어도 하나를 포함하는, 시스템.

청구항 32

제 30 항에 있어서,

상기 제어 모듈은 상기 동작 파라미터에 부분적으로 기초하여 상기 드리프트 챔버 내에 전자기계를 생성하는 전극들의 세트의 입력 파라미터를 변경하도록 동작가능한, 시스템.

청구항 33

제 17 항에 있어서,

상기 시스템과 통신하며 상기 시스템의 동작 파라미터의 결함을 식별하거나 검출하도록 동작가능한 제어 모듈을 더 포함하는, 시스템.

청구항 34

제 33 항에 있어서,

상기 제어 모듈은 상기 결함의 검출이나 식별에 부분적으로 기초하여 상기 동작 파라미터의 값을 변경하도록 동작가능한, 시스템.

청구항 35

제 17 항에 있어서,

상기 시스템을 감시하도록 상기 시스템과 통신하며, 상기 감시에 응답하여 상기 시스템의 동작 파라미터의 값을 설정하거나 조절하도록 동작가능한 제어 모듈을 더 포함하고,

상기 제어 모듈은 다변수 통계 분석 알고리즘에 기초하는, 시스템.

청구항 36

제 17 항에 있어서,

상기 드리프트 챔버에 대하여 배치되고, 시약 이온 또는 생성 이온이 사중극 질량 분석기 모듈을 향하여 통과하는 오리피스를 규정하고, 상기 사중극 질량 분석기 모듈에 의한 수집을 위해 상기 시약 이온 또는 생성 이온의 에너지 값을 특정하도록 동작가능한 추출 전극을 더 포함하는, 시스템.

청구항 37

제 17 항에 있어서,

상기 질량 분석기 모듈로 향하는 시약 이온과 생성 이온의 통로를 용이하게 하는 추출 오리피스 상에 상기 시약 이온과 상기 생성 이온을 포커싱하도록 상기 드리프트 챔버에 대하여 배치되는 렌즈 조립체를 더 포함하는, 시스템.

청구항 38

양자 전이 반응 질량 분석기 또는 화학적 이온 반응 질량 분석기에 대한 일정 수의 시약 이온을 생성하기 위한

방법으로서,

기상 시약을 플라즈마 챔버에 공급하는 단계와,

일정 수의 시약 이온을 생성하기 위해 마이크로파 공동(cavity)으로부터 플라즈마 챔버 내 기상 시약에 마이크로파 에너지를 전송함으로써 마이크로파 플라즈마를 생성하는 단계와,

상기 일정 수의 시약 이온을 비이온화, 가스 샘플의 하나 이상의 성분과 상호작용하여 드리프트 영역에서 생성 이온을 형성하기 위해 상기 드리프트 영역으로 향하게 하는 단계

를 포함하는, 방법.

청구항 39

삭제

청구항 40

삭제

청구항 41

제 38 항에 있어서,

상기 기상 시약은 수증기, 산소, 또는 아산화질소를 포함하고,

상기 일정 수의 시약 이온은 히드로늄 이온, 산소 이온, 또는 아산화질소 이온을 포함하는, 방법.

청구항 42

제 38 항에 있어서,

상기 마이크로파 에너지는 800MHz보다 큰 주파수를 갖는 전자기파에 의해 제공되는, 방법.

청구항 43

양자 전이 반응 질량 분석기 또는 화학적 이온 반응 질량 분석기에 대한 일정 수의 시약 이온을 생성하기 위한 방법으로서,

기상 시약을 플라즈마 챔버에 공급하는 단계와,

일정 수의 시약 이온을 생성하기 위해 고주파 RF 공동(cavity)으로부터 상기 플라즈마 챔버 내 기상 시약에 고주파 RF 에너지를 전송함으로써 고주파 RF 플라즈마를 생성하는 단계와,

상기 일정 수의 시약 이온을 비이온화, 가스 샘플의 하나 이상의 성분과 상호작용하여 드리프트 영역에서 생성 이온을 형성하기 위해 상기 드리프트 영역으로 향하게 하는 단계

를 포함하는, 방법.

청구항 44

제 43 항에 있어서,

상기 RF 에너지는 400kHz 내지 800MHz의 주파수를 갖는 전자기파에 의해 제공되는, 방법.

청구항 45

제 43 항에 있어서,

상기 일정 수의 시약 이온은 용량성 결합된 RF 플라즈마에 의해 생성되는, 방법.

청구항 46

기상 시약을 플라즈마 챔버에 공급하는 단계와,

일정 수의 시약 이온을 생성하기 위해 공동(cavity)으로부터 상기 플라즈마 챔버 내 기상 시약에 마이크로파 또

는 고주파 RF 에너지를 전송함으로써 마이크로파 또는 고주파 RF 프라즈마를 생성하는 단계와,

상기 일정 수의 시약 이온을 드리프트 챔버로 향하게 하는 단계와,

상기 일정 수의 시약 이온과 비이온화 가스 샘플의 하나 이상의 성분을 상호 작용시켜 상기 드리프트 챔버에서 하나 이상의 생성 이온을 생성하는 단계와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 사중극 질량 분석기 모듈의 컬렉터 영역으로 향하게 하는 단계와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도의 값을 상기 질량 분석기 모듈에 의해 결정하는 단계

를 포함하는, 방법.

청구항 47

질량 분석 시스템으로서,

공동(cavity)으로부터 플라즈마 챔버에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 전송함으로써 플라즈마 챔버 내 기상 시약 공급원으로부터 일정 수의 시약 이온을 생성하기 위한 수단과,

상기 일정 수의 시약 이온을 드리프트 챔버로 향하게 하는 수단과,

비이온화, 가스 샘플을 상기 일정 수의 시약 이온과 상호 작용시켜 상기 드리프트 챔버에서 하나 이상의 생성 이온을 형성하기 위한 수단과,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 컬렉터 영역으로 향하게 하도록 전자기계를 포함하는 수단과,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도의 값을 결정하도록 상기 컬렉터 영역과 통하는 수단

을 포함하는, 질량 분석 시스템.

청구항 48

일정 수의 시약 이온을 형성하도록 마이크로파 또는 RF 에너지에 의해 공동(cavity)에 적어도 부분적으로 위치된 플라즈마 챔버에서 기상 시약의 입자들을 이온화하기 위한 공동(cavity)에 배치된 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원과,

하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 비이온화, 가스 샘플이 드리프트 챔버에 입력되어 상기 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원으로부터 드리프트 챔버로 유도된 상기 일정 수의 시약 이온과 상호 작용할 수 있게 하는 입구 포트를 포함하는 드리프트 챔버와,

상기 드리프트 챔버의 출구 오리피스에 대하여 배치되는 질량 분석기 모듈을 포함하고,

상기 질량 분석기 모듈은,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온이 통과하며, 경로 길이를 규정하는 비행 영역과,

상기 비행 영역으로부터 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 수용하는 컬렉터 영역을 포함하고,

질량 값은 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각이 상기 경로 길이를 횡단하는 시간의 양에 기초하여 결정되는, 시스템.

청구항 49

제 48 항에 있어서,

상기 질량 분석기 모듈은,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 흐름을 상기 비행 영역 내로 펄스화하도록 상기 드

리프트 챔버의 출구 오리피스에 대하여 배치되는 이온 빔 조절기와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온이 이동하는 상기 경로 길이의 값을 증가시키도록 상기 비행 영역에 배치되는 광학 시스템

을 더 포함하는, 시스템.

청구항 50

제 49 항에 있어서,

상기 이온 빔 조절기는 제어기로부터 제공되는 의사 난수 이진 배열에 의해 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 흐름을 조절하는, 시스템.

청구항 51

제 50 항에 있어서,

분석 모듈은

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 피크 강도 또는 질량의 값을 결정하도록 상기 질량 분석기 모듈로부터 수신되는 데이터에 대하여 최대 우도 신호 처리 알고리즘을 수행하는, 시스템.

청구항 52

제 49 항에 있어서,

분석 모듈은 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도의 값을 결정하도록 상기 질량 분석기 모듈로부터 수신되는 데이터를 디콘볼루션하는, 시스템.

청구항 53

제 49 항에 있어서,

상기 컬렉터 영역은 펄스 카운팅 모드에서 동작하는 적층형 마이크로채널 판 검출기 또는 양극 검출기를 포함하는, 시스템.

청구항 54

제 49 항에 있어서,

상기 광학 시스템은 리플렉트론(reflectron)을 포함하는, 시스템.

청구항 55

제 49 항에 있어서,

상기 시약 이온과 상기 생성 이온을 상기 이온 빔 조절기 상으로 포커싱하기 위한 렌즈를 더 포함하고,

상기 이온 빔 조절기는 이온 빔 쵸퍼, 이온 빔 게이트, 이온 빔 변조기, 또는 이들의 임의의 조합을 포함하는, 시스템.

청구항 56

제 48 항에 있어서,

상기 드리프트 챔버와 상기 질량 분석기 모듈에 대하여 배치되는 광학 시스템을 더 포함하고,

상기 광학 시스템은 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 흐름이 이온 빔 조절기로 향하게 하는 적어도 하나의 사중극 렌즈를 포함하는, 시스템.

청구항 57

제 48 항에 있어서,

상기 질량 분석기 모듈은 상기 비행 영역을 통해 선형인 축을 규정하는, 시스템.

청구항 58

제 57 항에 있어서,

상기 선형인 축은 상기 비행 영역을 통과하는 제2 축에 평행한, 시스템.

청구항 59

제 48 항에 있어서,

상기 일정 수의 시약 이온의 서브세트가 상기 드리프트 챔버에 선택적으로 입력될 수 있도록 상기 마이크로파 에너지원과 상기 드리프트 챔버에 대하여 배치되는 질량 필터를 더 포함하는, 시스템.

청구항 60

제 59 항에 있어서,

상기 질량 필터는 사중극 질량 필터를 포함하는, 시스템.

청구항 61

제 48 항에 있어서,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도의 값들을 포함하는 질량 스펙트럼을 생성하도록 상기 질량 분석기 모듈로부터 데이터를 수신하는 분석 모듈을 더 포함하는, 시스템.

청구항 62

제 48 항에 있어서,

상기 질량 분석기 모듈에 의해 생성되는 질량 스펙트럼에 기초하여 상기 비이온화, 가스 샘플의 성분들을 식별하는 다변수 통계 분석 모듈을 더 포함하는, 시스템.

청구항 63

제 48 항에 있어서,

상기 시스템과 통신하며, 상기 시스템의 동작 파라미터에 기초하여 상기 시스템의 결함을 검출하거나 식별하도록 동작가능한 제어 모듈을 더 포함하는, 시스템.

청구항 64

제 63 항에 있어서,

상기 제어 모듈은 상기 결함의 검출이나 식별에 부분적으로 기초하여 상기 동작 파라미터의 값을 변경하도록 동작가능한, 시스템.

청구항 65

제 48 항에 있어서,

상기 시스템과 통신하며, 상기 시스템의 동작 파라미터에 기초하여 상기 시스템의 입력 파라미터의 값을 변경하도록 동작가능한 제어 모듈을 더 포함하는, 시스템.

청구항 66

제 48 항에 있어서,

상기 일정 수의 시약 이온과 상기 이온화, 가스 샘플 간의 상호 작용을 용이하게 하고 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 상기 드리프트 챔버의 출구 오리피스를 통과시키기 위한 계(field)를 생성하도록 상기 드리프트 챔버에 대하여 배치되는 전극들의 세트를 더 포함하는, 시스템.

청구항 67

제 66 항에 있어서,

상기 시스템의 동작 파라미터에 기초하여 상기 챔버 내의 계의 값을 결정하도록 동작가능하며 상기 전극들의 세트와 통신하는 제어 모듈을 더 포함하는, 시스템.

청구항 68

제 67 항에 있어서,

상기 시스템의 동작 파라미터는, 이온화, 가스 샘플의 조성, 드리프트 챔버의 압력, 상기 드리프트 챔버를 통과하는 상기 하나 이상의 생성 이온이나 상기 일정 수의 시약 이온의 속도, 상기 샘플이나 시약 이온이 상기 드리프트 챔버 내로 향하는 유량, 상기 하나 이상의 생성 이온이나 상기 일정 수의 시약 이온의 에너지, 시약 이온 또는 생성 이온의 화학적 조성, 또는 이들의 임의의 조합 중 적어도 하나를 포함하는, 시스템.

청구항 69

제 67 항에 있어서,

상기 제어 모듈은 상기 동작 파라미터에 부분적으로 기초하여 상기 전극들의 세트의 입력 파라미터를 변경하도록 동작가능한, 시스템.

청구항 70

일정 수의 시약 이온을 형성하도록 마이크로파 또는 RF 에너지에 의해 공동(cavity)에 적어도 부분적으로 위치된 플라즈마 챔버에서 기상 시약의 입자들을 이온화하기 위한 공동(cavity)에 배치된 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원과,

하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 비이온화, 가스 샘플이 드리프트 챔버에 입력되어 상기 마이크로파 또는 RF 에너지원으로부터 드리프트 챔버로 유도된 상기 일정 수의 시약 이온과 상호 작용할 수 있게 하는 입구 포트를 포함하는 드리프트 챔버와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각이 질량 분석기를 횡단하는 시간의 양에 기초하여 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 값을 포함하는 스펙트럼을 생성하도록 상기 드리프트 챔버의 출구 오리피스에 대하여 배치되는 비행시간형 질량 분석기 모듈

을 포함하는, 시스템.

청구항 71

제 70 항에 있어서,

상기 비행시간형 질량 분석기 모듈은,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온이 이동하며, 경로 길이를 규정하는 비행 영역과,

상기 비행 영역 내로의 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 흐름을 조절하는 이온 빔 조절기와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온이 이동하는 상기 경로 길이의 값을 증가시키도록 상기 비행 영역에 배치된 광학 시스템과,

상기 비행 영역으로부터 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 수용하는 컬렉터 영역

을 포함하는, 시스템.

청구항 72

비행시간형 질량 분석기에서 신호를 처리하기 위한 방법으로서,

상기 신호는 마이크로파 공동(cavity)으로부터 플라즈마 챔버 내 기상 시약에 마이크로파 에너지를 전송함으로써 마이크로파 플라즈마를 생성함으로써 생성되는 일정 수의 시약 이온에 기초하고 드리프트 영역에서 하나 이

상의 생성 이온을 형성하도록 상기 일정 수의 시약 이온을 전자기계에서 비이온화 샘플의 하나 이상의 성분과 상호 작용하기 위해 상기 드리프트 영역으로 유도함으로써 생성되는 하나 이상의 생성 이온에 기초하고,

상기 방법은,

상기 일정 수의 시약 이온과 상기 하나 이상의 생성 이온을 포함하는 제1 이온 흐름을 확립하는 단계와,

특정된 흐름 패턴에 따라 상기 제1 이온 흐름을 변경하여 제2 이온 흐름을 생성하는 단계와,

검출기에서 상기 제2 이온 흐름을 수신하는 단계와,

최대 우도형 통계적 알고리즘에 따라 상기 검출기에 의해 통신되는 데이터로부터 질량 스펙트럼 - 상기 질량 스펙트럼은 상기 일정 수의 시약 이온과 상기 하나 이상의 생성 이온의 각각의 피크 강도 또는 질량을 나타내는 데이터를 포함함 - 을 결정하는 단계

를 포함하는, 방법.

청구항 73

제 72 항에 있어서,

상기 제2 이온 흐름은 펄스화 흐름인, 방법.

청구항 74

제 73 항에 있어서,

상기 펄스화 흐름은 의사 난수 이진 배열에 따라 생성되는 특정 흐름 패턴에 기초하는, 방법.

청구항 75

기상 시약을 플라즈마 챔버에 공급하는 단계와,

일정 수의 시약 이온을 형성하기 위해 공동(cavity)으로부터 상기 플라즈마 챔버 내 상기 기상 시약에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 전송함으로써 마이크로파 또는 고주파 RF 플라즈마를 생성하는 단계와,

상기 일정 수의 시약 이온을 드리프트 챔버로 향하게 하는 단계와,

상기 일정 수의 시약 이온을 비이온화 가스 샘플과 상호 작용시켜 상기 드리프트 챔버에서 하나 이상의 생성 이온을 생성하는 단계와,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온을 비행시간형 질량 분석기 모듈의 비행 영역에서의 궤적을 따르게 하는 단계와,

상기 질량 분석기 모듈에 의해, 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도의 값을 결정하는 단계

를 포함하는, 방법.

청구항 76

일정 수의 시약 이온과 하나 이상의 생성 이온의 질량을 측정하기 위한 시스템으로서,

상기 일정 수의 시약 이온은 마이크로파 공동(cavity)으로부터 플라즈마 챔버 내 기상 시약에 마이크로파 에너지를 전송함으로써 마이크로파 플라즈마를 생성함으로써 생성되고 상기 하나 이상의 생성 이온은 드리프트 영역에서 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 상기 일정 수의 시약 이온을 전자기계에서 비이온화 샘플의 하나 이상의 성분과 상호 작용하기 위해 드리프트 영역으로 유도함으로써 생성되고,

상기 시스템은,

출구 오리피스를 통해 상기 일정 수의 시약 이온과 상기 하나 이상의 생성 이온을 포함하는 제1 이온 흐름을 수용하고 이온 빔 조절기로 향하는 제2 이온 흐름을 생성하도록 드리프트 관 조립체의 이온 출구 오리피스에 대하여 배치되는 사중극 렌즈들의 세트와,

상기 제2 이온 흐름이 비행시간형 질량 분석기의 비행 영역으로 향하는 것을 선택적으로 허용하도록 동작가능한

상기 이온 빔 조절기

를 포함하는, 시스템.

청구항 77

공동(cavity)으로부터 플라즈마 챔버 내 상기 기상 시약에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 전송함으로써 상기 플라즈마 챔버에서 기상 시약의 입자들을 이온화하는 수단과,

일정 수의 시약 이온을 드리프트 챔버로 향하게 하는 수단과,

하나 이상의 생성 이온을 생성하도록 상기 드리프트 챔버에서 상기 일정 수의 시약 이온과 비이온화, 가스 샘플을 상호 작용시키기 위한 전자기계를 포함하는 수단과,

상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온이 특정 거리를 횡단하는 시간량에 기초하여 상기 하나 이상의 생성 이온과 상기 일정 수의 시약 이온의 각각의 질량 또는 피크 강도의 값을 결정하기 위한 수단

을 포함하는, 시스템.

청구항 78

일정 수의 시약 이온과 하나 이상의 생성 이온의 질량을 측정하기 위한 시스템으로서,

상기 일정 수의 시약 이온은 마이크로파 공동(cavity)으로부터 플라즈마 챔버 내 기상 시약에 마이크로파 에너지를 전송함으로써 마이크로파 플라즈마를 생성함으로써 상기 하나 이상의 생성 이온은 드리프트 영역에서 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 상기 일정 수의 시약 이온을 전자기계에서 비이온화 샘플의 하나 이상의 성분과 상호 작용하기 위해 드리프트 영역으로 유도함으로써 생성되고,

상기 시스템은,

상기 일정 수의 시약 이온과 상기 하나 이상의 생성 이온을 포함하는 제1 이온 흐름을 확립하기 위한 수단과,

제2 이온 흐름을 생성하도록 특정 인터럽션 패턴에 따라 상기 제1 이온 흐름을 조절하기 위한 수단과,

검출기 수단으로부터 통신되는 데이터로부터 질량 스펙트럼을 생성하는 수단 - 상기 데이터는 상기 제2 이온 흐름에 대응함 -

을 포함하는, 질량 측정 시스템.

청구항 79

일정 수의 시약 이온과 하나 이상의 생성 이온의 질량을 측정하기 위한 시스템으로서,

상기 일정 수의 시약 이온은 마이크로파 공동(cavity)으로부터 플라즈마 챔버 내 기상 시약에 마이크로파 에너지를 전송함으로써 마이크로파 플라즈마를 생성함으로써 생성되고 상기 하나 이상의 생성 이온은 드리프트 영역에서 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 상기 일정 수의 시약 이온을 전자기계에서 비이온화 샘플의 하나 이상의 성분과 상호 작용하기 위해 드리프트 영역으로 유도함으로써 생성되고,

상기 시스템은,

상기 일정 수의 시약 이온과 상기 하나 이상의 생성 이온을 포함하는 제1 이온 흐름을 수용하고 조절 수단으로 향하는 제2 이온 흐름을 생성하기 위한 광학 수단과,

질량 분석기로 향하는 상기 제2 이온 흐름을 선택적으로 제어하기 위한 상기 조절 수단

을 포함하는, 질량 측정 시스템.

명 세 서

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 일반적으로 질량 분석법에 관한 것으로서, 보다 상세하게는, 마이크로파 또는 고주파 무선 주파수 플라즈마를 이용하여 시약 이온들이 형성되는 질량 분석법 및 이를 위한 응용에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 질량 분석법은 일반적으로 입자의 질량 값의 직접 측정 또는 스펙트럼 데이터를 이용한 다른 물리적 양의 측정에 의한 입자의 질량 값의 암시적 결정에 관한 것이다. 질량 분석법은 흔히 이온화된 분자 또는 성분의 질량 대 전하 비를 결정하는 것을 포함한다. 이온화된 입자의 전하가 알려져 있다면, 이 입자의 질량 값은 질량 값들의 스펙트럼으로부터 결정될 수 있다.

[0003] 질량 분석을 수행하기 위한 시스템은 질량 분석기로 알려져 있다. 질량 분석기 시스템은 일반적으로 이온 소스, 질량 필터 또는 분리기(separator), 및 검출기를 포함한다. 예를 들어, 분자들이나 성분들의 샘플은 이온을 생성하도록 이온 소스에서의 전자 충격에 의해 이온화될 수 있다. 질량 값이 서로 다른 이온들은 예를 들어 전계 또는 자계를 이온들에 인가함으로써 질량 분석기에 의해 질량 분포 또는 스펙트럼으로 분리된다. 검출기는 이온들을 수집하고, 질량 분포를 관찰하며 그리고/또는 기록할 수 있다. 스펙트럼의 비교적 많은 질량 값들을 이용하여 샘플의 분자나 성분의 아이덴티티 또는 질량 값과 샘플의 조성을 결정한다.

[0004] 이온 분자 반응 질량 분석기(IMR-MS)라 칭하는 카테고리를 비롯하여 서로 다른 많은 유형의 질량 분석기가 존재한다. 이 카테고리 내에는, 양자 전이 반응 질량 분석(PTR-MS) 및 선택 이온 흐름관 질량 분석(SIFT-MS)을 포함한 여러 기술들이 존재한다. 이러한 카테고리는 일반적으로 이온이 생성되게 하는 방법을 참조한다. 예를 들어, 양자 전이 반응 질량 분석기는 예를 들어 양자 전이에 의해 전하를 샘플 성분에 전이하도록 통상적으로 히드로늄 이온(H_3O^+)인 반응 시약을 생성하는 이온 소스를 포함한다. 선택 이온 흐름관 질량 분석기에서, 캐리어 가스는 필터링된 이온들을 흐름관을 따라 수송한다. 오스트리아 인스브룩에 소재한 Ionicon Analytik GmbH에 의해 판매되는 양자 전이 반응 질량 분석기에서는, 속이 빈 음극관을 이온 소스로서 사용하여, DC 플라즈마 방전을 수증기에 가함으로써 시약 이온(reagent ion)을 생성한다.

[0005] 일부 질량 분석 시스템들은 사용된 질량 분석기의 유형에 의해 분류된다. 예를 들어, 일부 질량 분석 시스템들은, 다른 분석 기술을 질량 분석 장비와 조합하여 사용하는 탠덤 기술(tandem technique)에 기초한다. 일례로는, 질량 분석기에 의한 분석 전에 가스 크로마토그래피 컬럼을 이용하여 샘플의 성분들을 분리하는 가스 크로마토그래피 질량 분석법(GC-MS)이 있다.

[0006] 질량 분석은 샘플에 있는 휘발성 유기 화합물(VOC)의 양을 결정하는 데 사용될 수 있다. VOC 측정은, 미소량의 VOC가 존재하더라도 이 VOC가 서로 다른 많은 응용 분야에 있어서 중요한 진단 지시기로서 기능할 수 있으며 인간의 건강에 악영향을 끼칠 수 있기 때문에 중요해졌다. 예를 들어, VOC의 농도가 소정의 레벨을 초과하게 되면, 호흡기 질환과 같이 인간의 건강에 해로운 영향을 끼칠 수 있다. 또한, 특정 샘플에 있는 VOC의 유형과 양은 폭발물, 유해한 화학제, 연소물, 병원균, 부패물이나 오염물, 방화 촉진제, 남용 약물이 존재함을 가리킬 수 있다. 또한, VOC의 존재와 양을 감시하는 것은 생화학적 또는 제약 제조 공정과 같은 산업적 처리에 있어서 유용하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 기존의 질량 분석 시스템에는 일반적으로 여러 단점들이 내재되어 있으며 또한 VOC의 검출에 적용될 때 내재되어 있다. 예를 들어, 가스 크로마토그래피를 채용하는 질량 분석 시스템은 비교적 느린 샘플 분석으로 인해 유체 샘플의 연속적인 실시간 감시에 적절하지 않다. 또한, 이전의 질량 분석 시스템은 현장 분석(in situ analysis)이 아닌 연구실 기반 환경에서의 샘플 분석 전에 현장으로부터 샘플 수집을 종종 필요로 한다. 이전의 질량 분석 시스템은, 예를 들어, 저 농도 구성 성분에 대한 식별가능한 질량 스펙트럼을 생성하도록 이온 소스가 충분한 양의 이온을 생성하지 않기 때문에, 샘플의 저 농도 성분에 상대적으로 민감하지 않다. 이러한 시스템에서의 저 농도 구성 성분에 대한 질량 스펙트럼은 흔히 동적 범위 제한으로 인해 노이즈와 구분되지 않으며, 또는 전자 장비나 기계 장비에 의해 발생하는 노이즈 또는 고 농도 성분으로부터의 피크 간섭에 의해 압도된다. 적절한 레벨의 감도를 갖는 질량 분석 시스템은 VOC의 존재의 검출을 용이하게 할 수 있지만, 존재하는 다른 화합물로부터 간섭받을 수 있으며 이에 따라 특정 화합물이나 종을 분명하게 식별하지 못할 수 있다.

[0008] 연속적이며 실시간으로 현장 분석을 제공할 수 있는 확고한 질량 분석 시스템이 필요하다. 또한, VOC의 미소

량을 포함하는 특정 샘플 내의 VOC의 존재와 식별을 신뢰성있게 결정할 수 있는 시스템이 필요하다.

과제의 해결 수단

[0009] 본 발명을 채용하는 시스템 및 방법은 마이크로파 에너지 또는 고주파 RF 에너지를 이용하여 예를 들어 유체 샘플과 상호 작용하기 위한 히드로늄 이온과 같은 시약 이온을 생성하는 질량 분석을 특징으로 한다. 마이크로파 에너지를 이용하면 DC 방전원에 연관된 전극 부식과 불안전성도 피하면서 알려져 있는 기타 이온화 방법(예를 들어, 방사성 소스가 사용됨)보다 많은 양으로 히드로늄과 같은 시약 이온을 생성하는 것으로 알려져 있다. 시약 이온의 양이 증가할수록 시스템 감도가 향상되어, 미소량으로도 개별적인 VOC의 정량 분석 및/또는 식별을 용이하게 한다. 고주파 RF 에너지도 질량 분석에 있어서 마이크로파 에너지를 이용하여 시약 이온을 생성할 때 얻는 이점들과 유사한 이점들을 나타낸다. 또한, 본 발명은 비교적 높은 압력으로, 예를 들어, 약 100 밀리바(약, 10,000 파스칼)를 초과하는 압력으로 VOC의 실시간 측정을 위한 시스템 및 방법에 관한 것이다.

[0010] 본 발명을 실시하는 시스템 및 방법은, 일부 실시예들에서, 약 pptV(parts-per-trillion by volume)의 농도로 VOC를 검출하도록 사용될 수 있다. 일부 실시예들에서, 모듈은 획득한 질량 스펙트럼에 기초하여 검출된 특정 VOC를 분석하고 분류한다. 본 발명의 실시예들에서 사용되는 시스템 컴포넌트들은 휴대용 질량 분석 및/또는 현장 응용에 적합하다. 본 명세서에서 설명하는 개념은, 화학적 이온화 반응 질량 분석(CIRMS) 기술 또는 양자 전이 반응 질량 분석(PTR-MS) 기술을 채용하는 질량 분석 시스템에서 이용될 수 있다.

[0011] 일부 실시예들에서, 본 발명은 시스템 동작 동안 획득되고, 검출되고, 또는 수집된 데이터를 처리하기 위한 분석 또는 제어 모듈을 포함한다. 예를 들어, 일부 시스템들은 질량 스펙트럼에 기초하여 VOC의 검출과 식별을 용이하게 하도록 다변수 분석 모듈을 포함한다. 또한, 질량 분석 시스템을 감시하거나 이러한 시스템 내의 결함을 검출하는 데 다변수 분석 모듈을 이용할 수 있다. 또한, 제어 모듈 또는 피드백 루프를 이용하여, 예를 들어, 질량 분석 시스템의 다양한 프로세스 파라미터들을 제어함으로써 시약 이온과 샘플 이온의 생성 및 질량 분석 시스템에서의 이들의 처리량을 제어할 수 있다. 이러한 파라미터들은 다양한 전계, 압력 값, 이온 및 기상 유량 및 이온 에너지를 포함한다. 또한, 본 발명은 질량 분석 시스템을 통한 시약 이온, 샘플 성분 및 생성 이온의 움직임에 영향을 끼치도록 다양한 시스템 컴포넌트들 간의 커플링, 접속, 또는 인터페이스에 관한 것이다.

[0012] 본 명세서에서 설명하는 양자 전이 반응 질량 분석기 및 화학적 이온화 반응 질량 분석기의 감도는 다양한 시스템 파라미터들에 기초하여 변경될 수 있다. 감도는 드리프트 영역에서의 시약 이온 농도(예를 들어, 히드로늄 이온 농도)에 기초하여 변경될 수 있다.

[0013] 드리프트 영역에서의 중성 입자들의 농도에 대한 전계의 (Townsends(Td)로 표현되는) E/N 비는 분석기의 감도에 영향을 끼칠 수 있다. E/N 비는 드리프트 영역에서의 전계와 압력(예를 들어, 가스 밀도)의 함수이다. E/N 비는 이온들이 드리프트 영역을 횡단하는 데 필요로 하는 시간에 영향을 끼친다.

[0014] 감도는 (시약 이온과 생성 이온으로 이루어지는) 드리프트 영역을 벗어난 후 질량 분석기에 도달하는 이온 빔의 강도에 의한 영향을 받는다. 이것은 빔 포커싱과 빔 투과 특성에 영향을 주는 전이 영역에서의 전이 광학(예를 들어, 전극/렌즈 개구 형상), 전계 및 압력 요법(펌핑)의 함수이다.

[0015] 감도는 드리프트 영역에서의 대용량 샘플 가스의 부분 압력과 중성 시약 종의 비에 기초하여 변경될 수 있다. 감시되고 있는 가스 샘플 종에 대한 양자 전이율 상수(k)는 감도에 영향을 끼친다. 드리프트 영역의 길이는 감도에 영향을 끼치며, 그 이유는 그 길이가 길어질수록 드리프트 영역은 물질이 드리프트 영역을 횡단하는 데 필요로 하는 시간을 더 필요로 하며, 이에 따라 시약 이온과 샘플 종이 반응할 기회를 더 필요로 하기 때문이다. 또한, 감도는 다양한 질량 분석 관련 감도 요인들(예를 들어, 이온 투과/질량 구별, 검출기/전치증폭기 이득 및 신호 대 잡음 비)에 의해 영향을 받는다.

[0016] 일 양태에서, 본 발명은 시스템에 관한 것이다. 이 시스템은 하나 이상의 시약 이온을 형성하도록 마이크로파 또는 RF 에너지에 의해 기상 시약(reagent vapor)의 입자들을 이온화하기 위한 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원을 포함한다. 또한, 이 시스템은 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 샘플이 챔버에 입력되어 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원으로부터의 하나 이상의 시약 이온과 상호 작용할 수 있게 하는 입구 포트를 포함하는 챔버를 포함한다. 챔버는 내부에 생성되는 전자기계를 갖는다. 또한, 시스템은 하나 이상의 생성 이온과 하나 이상의 시약 이온을 수집하여 생성 이온과 시약 이온의 각각의 질량 및/또는 피크 강도 값의 결정을 용이하게 하도록 챔버의 출구 오리피스에 대하여 배치된 사중극 질량 분석기 모듈을 포함한다.

[0017] 일부 실시예들에서, 마이크로파 에너지원은 마이크로파 플라즈마 발생기를 포함한다. 고주파 RF 에너지원은 용량성 결합 RF 플라즈마 발생기를 포함할 수 있다. 일부 실시예들에서, 시약 이온들은 히드로늄 이온들, 산소 이온들, 또는 아산화질소를 포함한다. 샘플은 하나 이상의 휘발성 유기 화합물(VOC)을 포함할 수 있다.

[0018] 시스템의 일부 실시예들은 챔버에 전자기계를 생성하도록 챔버에 대하여 배치된 전극들의 세트를 특징으로 한다. 전자기계는 시약 이온과 샘플 간의 상호 작용을 용이하게 하며, 생성 이온과 시약 이온이 챔버의 출구 오리피스를 통하도록 한다. 전극들의 세트는 챔버의 축에 대하여 방사상으로 배치될 수 있고, 전자기계는 생성 이온과 시약 이온이 대략 축 방향으로 향하게 한다. 일부 실시예들에서, 제어 모듈은 전극들의 세트와 통신한다. 제어 모듈은 시스템의 동작 파라미터에 기초하여 챔버 내의 전자기계(또는 전자기계 구배)의 값을 결정하도록 동작가능하다.

[0019] 시스템은 챔버에 입력되는 샘플의 양을 결정하도록 질량 흐름 제어기, 모세관, 또는 누출 밸브를 포함할 수 있다. 시스템은 시약 이온이 챔버 내로 전달되는 것을 선택적으로 허용하도록 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원과 챔버 사이에 배치된 질량 필터를 포함할 수 있다. 적절한 질량 필터의 예로는 사중극 질량 필터가 있다. 일부 실시예들에서, 시스템은, 사중극 질량 분석기 모듈로부터의 데이터를 분석하도록 동작가능하며 시스템과 통하는 다변수 분석 모듈을 포함한다.

[0020] 마이크로파 에너지원은 마이크로파 발생기, 공진기 부분, 공진기 부분 내에 배치되며 챔버와 통하는 관 부분, 및 기상 시약 공급원, 챔버, 또는 둘 다 내의 마이크로파 에너지의 양을 저감시키도록 관이 통과하는 하나 이상의 초크(choke)를 포함할 수 있다. 일부 실시예들에서, 시스템은 시스템의 동작 파라미터에 부분적으로 기초하여 시스템의 입력 파라미터를 변경하도록 동작가능하며 시스템과 통하는 제어 모듈을 포함한다. 이러한 파라미터들은, 샘플의 조성, 챔버의 압력, 챔버를 통과하는 생성 이온 또는 시약 이온의 속도, 챔버 내부로의 샘플 이온 또는 시약 이온의 유량, 생성 이온 또는 시약 이온의 에너지, 시약 이온, 생성 이온, 또는 샘플의 화학적 조성, 또는 이들의 임의의 조합을 포함한다. 일부 실시예들에서, 제어 모듈은 동작 파라미터에 부분적으로 기초하여 챔버 내에 전자기계를 발생하는 전극들의 세트의 입력 파라미터를 변경하도록 동작할 수 있다.

[0021] 일부 실시예들에서, 시스템은 시스템의 동작 파라미터의 결함을 검출하거나 식별하도록 시스템과 통신하는 제어 모듈을 포함한다. 제어 모듈은 결함의 검출이나 식별에 부분적으로 기초하여 동작 파라미터의 값을 변경할 수도 있다. 시스템은 시스템을 감시하도록 시스템과 통신하는 제어 모듈을 포함할 수 있다. 제어 모듈은 감시에 응답하여 시스템의 동작 파라미터의 값을 설정하거나 조절하고, 제어 모듈은 다변수 통계 분석 알고리즘에 기초한다. 일부 실시예들에서, 제어 모듈은 다변수 통계 분석 모듈을 포함한다. 다변수 통계 분석 모듈은 질량 분석 시스템에서 프로세스 감시 및/또는 결함 검출을 위해 사용될 수 있다. 다변수 통계 분석 모듈은 결함의 검출 및/또는 식별을 위해 사용될 수 있다. 일부 실시예들에서, 다변수 통계 분석 모듈은 (예를 들어, 질량 스펙트럼의) 질량 분광 데이터를 해석하는 데 사용되고, 질량 스펙트럼의 구성 피크들로부터의 성분들을 식별하는 데 사용될 수 있다. 다변수 통계 분석 모듈은 사중극 질량 분석기 또는 비행시간형 질량 분석기와 함께 사용될 수 있다. 일부 실시예들에서는, 제어 모듈 또는 다변수 통계 분석 모듈을 이용하여, 예를 들어, 질량 분석기의 구성 피크들로부터의 성분들을 식별하도록, 시스템의 결함의 검출 및/또는 식별, 데이터의 해석 및/또는 분석을 행한다.

[0022] 시스템은 챔버에 대하여 배치되는 추출 전극도 포함할 수 있다. 추출 전극은 시약 이온 또는 생성 이온이 사중극 질량 분석기 모듈로 향하여 통과하는 오리피스를 규정한다. 또한, 추출 전극은 사중극 질량 분석기 모듈이 수집하기 위한 시약 이온 또는 생성 이온의 에너지 값을 특정하도록 동작가능하다. 시스템의 일부 실시예들은, 시약 이온과 생성 이온의 질량 분석기 모듈로의 통과를 용이하게 하는 추출 오리피스에 시약 이온과 생성 이온을 포커싱하도록 챔버에 대하여 배치된 렌즈 조립체를 특징으로 한다.

[0023] 다른 일 양태에서, 본 발명은 양자 전이 반응 질량 분석기 또는 화학적 이온화 반응 질량 분석기를 위한 하나 이상의 시약 이온을 생성하는 방법에 관한 것이다. 이 방법은 기상 시약을 공급하는 단계와 마이크로파 에너지를 기상 시약에 제공하여 하나 이상의 시약 이온을 생성하는 단계를 포함한다.

[0024] 또한, 방법은 생성 이온을 형성하도록 하나 이상의 시약 이온을 샘플의 구성성분들과 상호 작용하게 하기 위한 영역으로 향하게 하는 단계를 포함할 수 있다. 시약 이온은 마이크로파 플라즈마에 의해 생성될 수 있다. 기상 시약은 수증기, 산소, 또는 아산화질소를 포함할 수 있고, 시약 이온은 히드로늄 이온, 산소 이온, 또는 아산화질소 이온을 포함할 수 있다. 일부 실시예들에서, 마이크로파 에너지는 약 800MHz보다 큰 주파수를 갖는 방사선 또는 전자기파에 의해 제공된다.

[0025] 또 다른 일 양태에서, 본 발명은 양자 전이 반응 질량 분석기 또는 화학적 이온화 반응 질량 분석기를 위한 하나 이상의 시약 이온을 생성하는 방법에 관한 것이다. 이 방법은 기상 시약을 공급하는 단계와 기상 시약에 고주파 RF 에너지를 제공하여 시약 이온을 생성하는 단계를 포함한다.

[0026] 일부 실시예들에서, RF 에너지는 약 400kHz 내지 약 800MHz 사이의 전자기파에 의해 제공된다. 시약 이온은 용량성 결합 RF 플라즈마에 의해 생성될 수 있다.

[0027] 또 다른 일 양태에서, 본 발명은 방법에 관한 것이다. 이 방법은 기상 시약을 플라즈마 영역에 공급하는 단계, 및 플라즈마 영역의 기상 시약에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 제공하여 하나 이상의 시약 이온을 형성하는 단계를 포함한다. 방법은 시약 이온을 가스 샘플과 상호 작용시켜 하나 이상의 생성 이온을 생성하는 단계를 포함한다. 또한, 방법은 생성 이온과 시약 이온을 사중극 질량 분석기 모듈의 컬렉터 영역으로 향하게 하는 단계, 및 생성 이온과 시약 이온의 질량 및/또는 피크 강도의 값을 질량 분석기 모듈에 의해 결정하는 단계를 포함한다.

[0028] 본 발명의 또 다른 양태는 질량 분석 시스템에 관한 것이다. 질량 분석 시스템은 기상 시약에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 제공함으로써 기상 시약 공급원으로부터 하나 이상의 시약 이온을 생성하기 위한 수단을 포함한다. 또한, 시스템은 시약 이온과 샘플을 상호 작용시켜 하나 이상의 생성 이온을 형성하기 위한 수단을 포함한다. 시스템은, 생성 이온과 시약 이온이 컬렉터 영역으로 향하도록 전자기계를 포함하는 수단을 포함한다. 또한, 시스템은 생성 이온과 시약 이온의 각각의 질량 및/또는 피크 강도의 값을 결정하도록 컬렉터 영역과 통하는 수단을 포함한다.

[0029] 일 양태에서, 본 발명은 시스템에 관한 것이다. 시스템은 하나 이상의 시약 이온을 형성하도록 마이크로파 또는 RF 에너지에 의해 기상 시약의 입자들을 이온화하기 위한 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원을 포함한다. 또한, 시스템은 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 샘플이 입력되어 마이크로파 또는 RF 에너지원으로부터의 시약 이온과 상호 작용하기 위한 챔버를 포함한다. 또한, 시스템은 챔버의 출구 오리피스에 대하여 배치되는 질량 분석기 모듈을 포함한다. 질량 분석기 모듈은 생성 이온 또는 시약 이온이 이동하며 경로 길이를 규정하는 비행 영역을 포함한다. 또한, 질량 분석기 모듈은 비행 영역으로부터 생성 이온 또는 시약 이온을 수용하기 위한 컬렉터 영역을 포함한다. 생성 이온 또는 시약 이온의 질량 값은 생성 이온과 시약 이온이 경로 길이를 횡단하는 시간량에 기초하여 결정된다.

[0030] 일부 실시예들에서, 질량 분석기 모듈은 생성 이온과 시약 이온의 흐름이 비행 영역 내로 향하여 펄스화하도록 챔버의 출구 오리피스에 대하여 배치되는 이온 빔 조절기도 포함한다. 또한, 질량 분석기 모듈은 생성 이온과 시약 이온이 이동하는 경로 길이의 값을 증가시키도록 비행 영역에 배치되는 광학 시스템을 포함한다. 이온 빔 조절기는 제어기로부터 제공되는 의사 난수 이진 배열에 의해 생성 이온과 시약 이온의 흐름을 조절할 수 있다. 일부 실시예들에서, 분석 모듈은 질량 분석기 모듈로부터 수신되는 데이터에 대하여 최대 우도 신호 처리 알고리즘(maximum likelihood signal processing algorithm)을 수행하여 생성 이온과 시약 이온의 질량 및/또는 피크 강도 값을 결정한다. 분석 모듈은 질량 분석기 모듈로부터 수신되는 데이터를 디콘볼루션(deconvolute)하여 생성 이온 또는 시약 이온의 질량 및/또는 피크 강도의 값을 결정할 수 있다. 컬렉터 영역은 펄스 계수 모드에서 동작하는 적층형 마이크로채널 판 검출기 또는 양극 검출기를 포함할 수 있다. 일부 실시예들에서, 광학 시스템은 리플렉트론(reflectron)을 포함한다. 시스템은 이온 빔 조절기 상에 시약 이온과 생성 이온을 포커싱하기 위한 렌즈를 특징으로 할 수 있으며, 이온 빔 조절기는 이온 빔 쵸퍼(chopper), 이온 빔 게이트, 이온 빔 변조기, Bradbury-Nielsen 게이트, 또는 이들의 임의의 조합을 포함한다.

[0031] 또한, 일부 실시예들에서, 시스템은 챔버와 질량 분석기 모듈에 대하여 배치되는 광학 시스템을 특징으로 한다. 광학 시스템은 시약 이온과 생성 이온의 흐름이 이온 빔 조절기로 향하도록 적어도 하나의 사중극 렌즈를 포함한다. 일부 실시예들에서, 질량 분석기 모듈은 비행 영역을 통과하는 대략 선형 축을 규정한다. 대략 선형 축은 비행 영역(예를 들어, Uthoff 궤적)을 통과하는 제2 축에 대략 평행할 수 있다.

[0032] 일부 실시예들에서, 시스템은 시약 이온들의 서브세트가 챔버에 입력되는 것을 선택적으로 허용하도록 마이크로파 에너지원과 챔버에 대하여 배치되는 질량 필터를 포함한다. 질량 필터는 사중극 질량 필터일 수 있다. 시스템은 생성 이온과 시약 이온의 질량 및/또는 피크 강도의 값들을 포함하는 질량 스펙트럼의 데이터를 해석하도록 질량 분석기 모듈로부터의 데이터를 수신하는 분석 모듈을 특징으로 할 수 있다. 분석 모듈을 이용하여 질량 분석 시스템의 결함을 검출 및/또는 식별할 수 있다. 분석 모듈은 다변수 통계 분석에 기초할 수 있다.

[0033] 일부 실시예들에서, 시스템은 질량 분석기 모듈에 의해 생성되는 질량 스펙트럼에 기초하여 샘플의 성분들을 식

별하는 다변수 통계 분석 모듈을 특징으로 한다. 시스템은 시스템의 동작 파라미터에 기초하여 시스템의 결함을 검출하거나 식별하도록 동작가능하며 시스템과 통신하는 제어 모듈을 포함할 수 있다. 제어 모듈은 결함의 식별 또는 검출에 부분적으로 기초하여 동작 파라미터의 값을 변경할 수 있다.

[0034] 시스템은 시스템의 동작 파라미터에 기초하여 시스템의 입력 파라미터의 값을 변경하도록 시스템과 통신하는 제어 모듈을 포함할 수 있다. 일부 실시예들에서, 시스템은, 생성 이온과 샘플 간의 상호 작용을 용이하게 하기 위한 필드를 생성하도록 그리고 생성 이온과 시약 이온이 챔버의 출구 오리피스를 통과하도록 챔버에 대하여 배치되는 전극들의 세트를 포함한다. 이러한 시스템은 시스템의 동작 파라미터에 기초하여 챔버 내의 필드의 값을 결정하도록 전극들의 세트와 통신하는 제어 모듈을 특징으로 할 수 있다. 시스템의 동작 파라미터는, 샘플의 조성, 챔버의 압력, 생성 이온 또는 시약 이온이 챔버를 통과하는 속도, 챔버 내로의 샘플 이온 또는 시약 이온의 유량, 생성 이온 또는 시약 이온의 에너지, 생성 이온, 시약 이온, 또는 샘플의 화학적 조성, 또는 이들의 임의의 조합을 포함한다. 또한, 제어 모듈은 동작 파라미터에 부분적으로 기초하여 전극들의 세트의 입력 파라미터를 변경하도록 동작가능하다.

[0035] 또 다른 양태에서, 본 발명은 시스템에 관한 것이다. 시스템은 하나 이상의 시약 이온을 형성하도록 마이크로파 또는 RF 에너지에 의해 기상 시약의 입자들을 이온화하기 위한 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원을 포함한다. 시스템은 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 샘플이 입력되어 마이크로파 또는 RF 에너지원으로부터의 생성 이온과 상호 작용할 수 있게 하는 입구 포트를 포함하는 챔버를 포함한다. 또한, 시스템은 생성 이온과 시약 이온의 각각이 질량 분석기를 횡단하는 시간량에 기초하여 생성 이온과 시약 이온의 질량 값을 포함하는 스펙트럼을 생성하도록 챔버의 출구 오리피스에 대하여 배치되는 비행시간형 질량 분석기 모듈을 포함한다.

[0036] 일부 실시예들에서, 비행시간형 질량 분석기 모듈은 생성 이온과 시약 이온이 통과하는 비행 영역을 포함한다. 비행 영역은 경로 길이를 규정한다. 또한, 비행시간형 질량 분석기 모듈은, 비행 영역 내로의 생성 이온 또는 시약 이온의 흐름을 조절하기 위한 이온 빔 조절기, 및 생성 이온과 시약 이온이 이동하는 경로 길이를 증가시키도록 비행 영역에 배치되는 광학 시스템을 포함한다. 또한, 분석기 모듈은 비행 영역으로부터의 생성 이온과 시약 이온을 수용하기 위한 컬렉터를 포함한다.

[0037] 또 다른 양태에서, 본 발명은 비행시간형 질량 분석기의 신호들을 처리하기 위한 방법에 관한 것이다. 신호들은 마이크로파 또는 RF 에너지를 기상 시약에 제공함으로써 생성되는 하나 이상의 시약 이온에 기초하며, 전자기계의 유체 샘플과 시약 이온을 상호 작용시킴으로써 생성되는 하나 이상의 생성 이온에 또한 기초한다. 방법은 시약 이온과 생성 이온을 포함하는 제1 이온 흐름을 확립하는 단계, 및 특정 흐름 패턴에 따르는 제2 이온 흐름을 생성하도록 제1 이온 흐름을 변경하는 단계를 포함한다. 또한, 방법은 검출기에서 제2 이온 흐름을 수용하는 단계, 및 최대 우도형 통계 알고리즘에 따라 검출기에 의해 통신되는 데이터로부터 질량 스펙트럼을 결정하는 단계를 포함한다. 질량 스펙트럼은 시약 이온과 생성 이온의 질량 및/또는 피크 강도를 나타내는 데이터를 포함한다.

[0038] 일부 실시예들에서, 제2 이온 흐름은 펄스화 흐름이다. 펄스화 흐름은 의사 난수 이진 배열에 따라 생성되는 특정 흐름 패턴에 기초할 수 있다.

[0039] 또 다른 양태에서, 본 발명은 방법에 관한 것이다. 이 방법은 기상 시약을 플라즈마 영역에 공급하는 단계, 및 하나 이상의 시약 이온을 형성하도록 플라즈마 영역의 기상 시약에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 제공하는 단계를 포함한다. 또한, 방법은 하나 이상의 생성 이온을 생성하도록 시약 이온을 가스 샘플과 상호 작용시키는 단계를 포함한다. 방법은 생성 이온과 시약 이온이 비행시간형 질량 분석기 모듈의 비행 영역에서 궤적을 따라 향하게 하는 단계를 포함한다. 또한, 방법은 생성 이온과 시약 이온의 질량 및/또는 피크 강도의 값을 질량 분석기 모듈에 의해 결정하는 단계를 포함한다.

[0040] 본 발명의 일 양태는 하나 이상의 시약 이온과 하나 이상의 생성 이온의 질량을 측정하기 위한 시스템에 관한 것이다. 시약 이온은 마이크로파 또는 RF 에너지를 기상 시약에 제공함으로써 생성된다. 생성 이온은 전자기계에서 하나 이상의 시약 이온을 유체 샘플과 상호 작용시킴으로써 생성된다. 시스템은 시약 이온과 생성 이온을 포함하는 제1 이온 흐름을 수용하도록 드리프트 관 조립체의 이온 출구 오리피스에 대하여 배치되는 사중극 렌즈들의 세트를 포함한다. 렌즈들의 세트는 출구 오리피스를 통해 생성 이온과 시약 이온을 수용하며, 이온 빔 조절기로 향하는 제2 이온 흐름을 생성한다. 또한, 시스템은 제2 이온 흐름이 비행시간형 질량 분석기의 비행 영역으로 전달되는 것을 선택적으로 허용하도록 동작가능한 이온 빔 조절기를 포함한다.

[0041] 또 다른 양태에서, 본 발명은 시스템에 관한 것이다. 시스템은 하나 이상의 시약 이온을 형성하도록 마이크로

파 또는 고주파 RF 에너지에 의해 기상 시약의 입자들을 이온화하기 위한 수단을 포함한다. 또한, 시스템은 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 시약 이온과 샘플을 상호 작용시키도록 전자기계를 포함하는 수단을 포함한다. 또한, 시스템은 생성 이온과 시약 이온이 특정 거리를 횡단하는 시간량에 기초하여 생성 이온과 시약 이온의 각각의 피크 강도 및/또는 질량의 값을 결정하기 위한 수단을 포함한다.

[0042] 또 다른 양태에서, 본 발명은 하나 이상의 시약 이온과 하나 이상의 생성 이온의 질량을 측정하기 위한 시스템에 관한 것이다. 시약 이온은 마이크로파 또는 RF 에너지를 기상 시약에 제공함으로써 생성된다. 생성 이온은 전자기계에서 시약 이온을 유체 샘플과 상호 작용시킴으로써 생성된다. 시스템은 시약 이온과 생성 이온을 포함하는 제1 이온 흐름을 확립하기 위한 수단을 포함한다. 또한, 시스템은 제2 이온 흐름을 생성하도록 특정 인터럽션 패턴에 따라 제1 이온 흐름을 조절하기 위한 수단을 포함한다. 또한, 시스템은 검출 수단으로부터 통신되는 데이터로부터 질량 스펙트럼을 생성하기 위한 수단을 포함한다. 데이터는 제2 이온 흐름에 대응한다.

[0043] 또 다른 양태에서, 본 발명은 하나 이상의 시약 이온과 하나 이상의 생성 이온의 질량을 측정하기 위한 시스템에 관한 것이다. 시약 이온은 마이크로파 또는 RF 에너지를 기상 시약에 제공함으로써 생성된다. 생성 이온은 전자기계에서 시약 이온을 유체 샘플과 상호 작용시킴으로써 생성된다. 시스템은 시약 이온과 생성 이온을 포함하는 제1 이온 흐름을 수용하기 위한 광학 수단을 포함한다. 또한, 광학 수단은 조절 수단으로 향하는 제2 이온 흐름을 생성한다. 또한, 시스템은 질량 분석기로 향하는 제2 이온 흐름을 선택적으로 제어하기 위한 그 조절 수단을 포함한다.

[0044] 또 다른 양태에서, 본 발명은 방법에 관한 것이다. 방법은 샘플 가스를 도입하는 단계를 포함한다. 또한, 방법은 기상 시약을 플라즈마 영역에 공급하는 단계 및 하나 이상의 시약 이온을 형성하도록 플라즈마 영역의 기상 시약에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 제공하는 단계를 포함한다. 또한, 방법은 하나 이상의 생성 이온을 생성하도록 하나 이상의 시약 이온을 샘플 가스와 상호 작용시키는 단계 및 생성 이온과 시약 이온을 사중극 또는 비행시간형 질량 분석기 모듈로 향하게 하는 단계를 포함한다. 방법은 생성 이온과 시약 이온의 질량 또는 피크 강도의 값을 질량 분석기 모듈에 의해 결정하는 단계를 포함한다.

[0045] 또 다른 양태에서, 본 발명은 시스템에 관한 것이다. 시스템은 하나 이상의 시약 이온을 형성하도록 마이크로파 또는 RF 에너지에 의해 기상 시약의 입자들을 이온화하기 위한 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원을 포함한다. 시스템은 적어도 미소 농도로 하나 이상의 휘발성 유기 화합물을 포함하는 샘플 가스의 분석을 용이하게 하기 위한 공급원을 포함한다. 또한, 시스템은 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 샘플 가스가 입력되어 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지원으로부터의 시약 이온과 상호 작용할 수 있게 하는 입구 포트를 갖는 챔버를 포함한다. 챔버는 챔버에서 생성되는 전자기계를 갖는다. 또한, 시스템은 생성 이온과 시약 이온을 수집하여 생성 이온과 시약 이온의 질량 또는 피크 강도의 값의 결정을 용이하게 하도록 챔버의 출구 오리피스에 대하여 배치되는 사중극 또는 비행시간형 질량 분석기 모듈을 포함한다.

[0046] 또 다른 양태에서, 본 발명은 적어도 미소 농도로 하나 이상의 휘발성 유기 화합물을 포함하는 샘플 가스를 도입하기 위한 수단을 포함하는 질량 분석 시스템에 관한 것이다. 시스템은 기상 시약 공급원에 마이크로파 또는 고주파 RF 에너지를 제공함으로써 기상 시약으로부터 하나 이상의 시약 이온을 생성하기 위한 수단을 포함한다. 시스템은 하나 이상의 생성 이온을 형성하도록 샘플 가스를 시약 이온과 상호 작용시키기 위한 수단을 포함한다. 또한, 시스템은, 생성 이온과 시약 이온의 피크 강도 또는 질량 중 적어도 하나를 결정하도록 또는 샘플 가스의 휘발성 유기 화합물을 식별하도록 생성 이온과 시약 이온이 질량 분석기 모듈로 향하게 하는 수단을 포함한다.

[0047] 추가 특징들은 전술한 양태들에 관한 것이다. 예를 들어, 샘플 가스는 적어도 미소 농도로 하나 이상의 휘발성 유기 화합물을 포함한다. 미소 농도는 약 1pptv 내지 약 1ppbv일 수 있다. 미소 농도는 약 1ppbv 내지 약 1ppmv일 수 있다.

[0048] 또한, 방법은 가스 샘플 입구 포트를 밀폐 공간에 연결하는 단계를 포함할 수 있다. 또한, 방법은 가스 샘플 입구 포트를 비-밀폐 공간에 위치시키는 단계를 포함할 수 있다. 가스 샘플 입구 포트는 컨테이너에 연결될 수 있다. 일부 실시예들에서, 가스 샘플 입구 포트는 자동차나 항공기의 배기관에 연결된다. 가스 샘플 입구 포트는 예를 들어 음식이나 음료 제품의 함유량을 결정하기 위해 음식이나 음료 제품 위의 헤드스페이스에 연결될 수 있다.

[0049] 일부 실시예들에서, 방법은 날숨을 가스 샘플 입구 포트 내에 도입하도록 인간의 입에 가깝게 가스 샘플 입구 포트를 위치시키는 단계를 포함한다. 방법은 가스 또는 증기로서 방출되고 있는 고체 샘플 물질에 가깝게 가스

샘플 입구 포트를 위치시키는 단계를 포함한다. 일부 실시예들에서, 가스 샘플 입구 포트는 가스 공급원에 연결된다.

[0050] 사중극 또는 비행시간형 질량 분석기 모듈은 가스 샘플의 휘발성 유기 화합물의 피크 강도 또는 질량 중 적어도 하나, 또는 휘발성 가스 화합물의 아이덴티티의 결정을 용이하게 할 수 있다. 미소 농도로 측정, 검출, 및/또는 식별될 수 있는 휘발성 유기 화합물로는, 다이옥신계 화합물, 푸란계 화합물, 클로로페놀, 나프탈렌, 벤젠, 에틸벤젠, 크실렌, 넌메탄 유기 화합물, 이차 유기 에어로졸, 동중 원소 화합물, 화학 무기 작용제, 전장 가스, 화재 촉진제, 체액에 의해 또는 곰팡이 종(예를 들어, 진균독)의 활동을 통해 방출되는 VOC 종, 또는 이들의 임의의 조합이 있다. 일부 실시예들에서, 휘발성 유기 화합물은 인위개변적(anthropogenic) 또는 자연적(biogenic) 휘발성 유기 화합물을 포함한다. 일부 실시예에서, 샘플 가스는 무기 가스 또는 기상 종(예를 들어, 황화수소)을 포함한다.

[0051] 하나 이상의 예의 상세는 첨부 도면과 이하의 설명에서 개시되어 있다. 본 발명의 추가 특징, 양태 및 이점은 상세한 설명, 도면 및 청구범위로부터 명백하다.

발명의 효과

[0052] 연속적이며 실시간으로 현장 분석을 제공할 수 있는 확고한 질량 분석 시스템을 제공한다. 또한, VOC의 미소량을 포함하는 특정 샘플 내의 VOC의 존재와 식별을 신뢰성있게 결정할 수 있는 시스템을 제공한다.

도면의 간단한 설명

[0053] 도 1은 본 발명을 실시하는 시스템의 구성요소들을 도시하는 평면도이다.

도 2는 질량 분석 시스템에 대한 기상 시약 공급 조립체의 단면도이다.

도 3은 시약 이온을 생성하기 위한 방법의 흐름도이다.

도 4는 본 발명을 실시하는 질량 분석법을 도시하는 흐름도이다.

도 5는 본 발명을 실시하는 4중극 질량 분석 시스템의 단면도이다.

도 6은 도 5에 도시한 드리프트 챔버 조립체의 확대도이다.

도 7은 본 발명을 실시하는 비행시간형 질량 분석기 모듈의 평면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0054] 도 1은 본 발명을 실시하는 시스템(100)의 컴포넌트들을 도시하는 평면도이다. 시스템(100)은 기상 시약 공급원(104) 및 플라즈마 발생기(108)를 포함한다. 마이크로파/RF 플라즈마 발생기(108)는 마이크로파 에너지(마이크로파 플라즈마) 또는 고주파 RF 에너지(RF 플라즈마)를 이용하여 플라즈마를 발생할 수 있다. RF 에너지는 용량성 결합 고주파 RF 에너지원(도시하지 않음)에 의해 공급될 수 있다. 기상 시약 공급원(104)으로부터의 기상 시약(도시하지 않음)은 플라즈마 영역(112)의 플라즈마와 상호 작용하여 필요로 하는 또는 특정한 시약 이온이 형성되며, 이 시약 이온은 시스템(100)에 대한 특정 응용에 따라 서로 다른 다수의 종 중 하나 이상의 종일 수 있다. 일부 실시예들에서, 플라즈마 영역(112) 및 마이크로파/RF 플라즈마 발생기(108)는 기상 시약이 조립체 내에서 플라즈마와 상호 작용하도록 동일한 조립체(도시하지 않음)의 부분들을 형성한다. 일부 실시예들에서, 플라즈마 영역(112)은 유리관 내에 배치된다.

[0055] 플라즈마 영역(112)은 플랜지(116) 내에 장착되는 전기적으로 분리된 오리피스 판 전극(120)에 유체 연통한다. 절연체(도시하지 않음)는 플랜지(116)와 오리피스 판 전극(120) 사이에 전기적 분리를 제공하도록 이들 사이에 배치된다. 전위가 오리피스 판 전극(120)에 인가되어 플라즈마의 전위가 증가되고, 이에 따라 하나 이상의 시약 이온이 플랜지(116)와 오리피스 판 전극(120)에 의해 규정되는 개구(122)를 통과하여 드리프트 외측 챔버(124) 내의 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 내로 향하게 된다. 화학적 이온화/드리프트 영역(136)은 오리피스 판 전극(120)보다 낮은 전위로 유지된다. 샘플 공급원(128)은 샘플 유체(예를 들어, 샘플 가스)를 시스템(100)에 제공하도록 화학적 이온화/드리프트 영역(136)과 유체 연통한다. 샘플 가스는 드리프트 외측 챔버(124)의 표면(도시하지 않음)을 통과하여 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 내부로 흐르도록 입구 포트(도시하지 않음) 내로 흐른다. 입구 포트는 플랜지(116) 내의 중심에 위치하는 오리피스 판 전극(120)의 하측으로 위치하여, 시약 이온이 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 내의 샘플 가스의 성분과 혼합되게 할 수 있다. 시약

이온과 샘플 가스를 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 내부로 도입하기 위한 기타 구성은 존재하며 본 발명의 범위 내에 있다. 예를 들어, 입구 포트는, 개구(122)에 대하여 방사상으로 위치하는 유체 경로(도시하지 않음)를 통해 샘플 가스가 흐를 때 "샤워헤드" 효과를 생성하도록 플랜지(116)에 연결될 수 있다.

[0056] 드리프트 조립체(126)는 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 및 펌프형 드리프트 외측 챔버(124)를 포함한다. 펌프형 드리프트 외측 챔버(124)는 화학적 이온화/드리프트 영역(136)을 효과적으로 수용한다. 화학적 이온화/드리프트 영역(136)은 (중간 O-링 밀봉체(도시하지 않음)를 갖는) 일련의 전극들과 절연판들에 의해 규정될 수 있으며, 이러한 일련의 전극들과 절연판들의 각각에는 중심을 관통하는 통로가 배치되어 있다. 화학적 이온화/드리프트 영역(136)은 도 5와 도 6을 참조하여 더 상세히 설명한다. 화학적 이온화/드리프트 영역(136)은 샘플과 시약 이온 간의 상호 작용(예를 들어, 화학 반응)을 용이하게 한다. 샘플과 시약 이온 간의 상호 작용은 하나 이상의 생성 이온을 형성한다. 통상적으로, 시약 이온들은 샘플 가스의 성분들보다 훨씬 더 많으며, 시약 이온들은 생성 이온들이 생성된 후 생성 이온 스트림에서 감시될 수 있다. 화학적 이온화/드리프트 영역(136)은 일반적으로 샘플과 시약 이온이 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 내에서 혼합될 때 샘플과 시약 이온 간의 상호 작용을 용이하게 하도록 전자기계(도시하지 않음)를 포함한다. 화학적 이온화/드리프트 영역(136)의 전자기계도 시약 이온과 생성 이온이 출구 오리피스(138)를 향하게 한다.

[0057] 출구 오리피스(138)를 통해 화학적 이온화/드리프트 영역(136)을 통과하는 이온들은 플랜지(140)에 의해 규정되는 출구 오리피스(144) 상으로 포커싱된다. 출구 오리피스(144)는 이온들이 드리프트 외측 챔버(124)를 벗어날 수 있게 한다. 이온들은 렌즈 조립체(142)에 의해 출구 오리피스(144) 상으로 포커싱된다. 일부 실시예들에서, 렌즈 조립체(142)는 포커스 개구를 포함한다. 일부 실시예들은 렌즈 조립체(142)를 위해 3요소 아인젤(three-element Einzel) 렌즈를 채용한다. 렌즈 조립체(142)는 예를 들어 이온의 유속, 속도 또는 모멘텀과 같은 특정 흐름 파라미터들에 따라 이온들이 질량 분석기 모듈(148)측으로 향하게 한다. 렌즈 조립체(142)를 이용하여 출구 오리피스(144)를 통과하는 이온들의 수를 최적화할 수 있다. 일부 실시예들에서, 시스템(100)은 렌즈 조립체를 포함하지 않는다.

[0058] 질량 분석기 모듈(148)은 예를 들어 이온들을 수집함으로써 시약 이온과 생성 이온의 질량과 양을 결정한다. 질량 분석기 모듈(148)은 출구 오리피스(144)를 통과하는 시약 이온과 생성 이온을 나타내는 질량 스펙트럼 결과를 생성하고 그리고/또는 분석한다. 생성 이온과 연관된 질량 스펙트럼은 샘플 공급원(128)에 의해 제공되는 샘플의 존재, 양, 부피, 농도, 또는 아이덴티티를 결정하는 데 사용될 수 있다. 시약 이온의 측정을 이용하여 시스템(100)을 교정(calibrate)하고 그리고/또는 에러 체크한다. 질량 분석기 모듈(148)은 사중극 질량 분석기 또는 비행시간형 질량 분석기일 수 있다.

[0059] 시스템(100)은 제어 모듈(152)도 포함한다. 제어 모듈(152)은 시스템(100)의 파라미터 또는 동작 상태에 대한 데이터를 수신한다. 이 데이터에 기초하여, 제어 모듈(152)은 시스템의 컴포넌트들에 대한 입력 값들 또는 입력 동작 파라미터들을 결정하거나 설정할 수 있다. 예를 들어, 제어 모듈(152)은 기상 시약 공급원(104), 플라즈마 발생기(108), 플라즈마 영역(112), 오리피스 판 전극(120), 화학적 이온화/드리프트 영역(136), 렌즈 조립체(142), 출구 오리피스 전극(144), 또는 질량 분석기 모듈(148)로부터 데이터를 수신할 수 있다. 제어 모듈(152)은, 수집한 데이터에 응답하여, 예를 들어, 시스템(100)이 개시되거나 동작 파라미터에 관하여 수신되는 데이터에 응답할 때, 이러한 컴포넌트들의 각각에 대한 입력 값들을 설정할 수 있다.

[0060] 일부 실시예들에서, 제어 모듈(152)은 동작 파라미터에 관하여 수신되는 데이터에 응답하여 자동으로 동작 파라미터에 대한 입력 값들을 갱신한다. 예를 들어, 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 내의 압력이나 전자기계에 관한 동작 파라미터들이 이러한 파라미터들에 대한 특정 값이나 원하는 값으로부터 벗어나면, 제어 모듈(152)은, 파라미터들이 그러한 파라미터들에 대한 입력 값들이나 정정 값들에 대응할 때까지 전자기계를 생성하는 전극들(도시하지 않음) 또는 화학적 이온화/드리프트 영역(136)의 압력을 설정하는 샘플 공급원(128)을 조절할 수 있다. 다른 동작 파라미터들은, 시스템(100)에서의 시약 이온 또는 생성 이온의 속도나 에너지, 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 내로의 유체 샘플의 유량, 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 내로의 시약 이온의 유량, 샘플의 조성, 샘플과 시약 이온의 상대 농도, 또는 시약 이온과 생성 이온의 상대 농도를 포함한다. 일부 실시예들에서, 제어 모듈(152)은 시스템(100)의 다수의 동작 파라미터들을 감시한다.

[0061] 일부 실시예들에서, 제어 모듈(152)은 시스템(100)의 파라미터들을 수신하고 그리고/또는 갱신하기 위한 플라즈마 계측 프로세스를 이용한다. 플라즈마 계측 프로세스는, 예를 들어, 플라즈마 영역(112)으로부터의 발광 스펙트럼을 감시할 수 있다. 발광 스펙트럼에 기초하여, 제어 모듈(152)은, 플라즈마 영역(112) 내의 동작 파라미터들(예를 들어, 플라즈마 파라미터들)의 값, 예를 들어, 특정 발광 파장의 강도를 결정하고, 파라미터가 특

정 값이나 원하는 값으로부터 벗어나면, 제어 모듈(152)은 플라즈마 파라미터들이 그 파라미터들에 대한 최적 값들에 대응할 때까지 이러한 플라즈마 파라미터들을 조절할 수 있다. 제어 모듈(152)이 최적의 상태 또는 파라미터를 얻을 수 없다면, 결함 상태를 검출 및/또는 등록할 수 있다.

[0062] 일부 실시예들에서, 질량 필터(도시하지 않음)는 마이크로파/RF 플라즈마 영역(112) 및 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 사이에 위치할 수 있다. 질량 필터는 시약 이온이 화학적 이온화/드리프트 영역(136) 내로 전달되는 것을 선택적으로 허용하는 데 사용될 수 있다. 일부 실시예들에서, 질량 필터는 사중극 질량 필터이다.

[0063] 시스템(100)은 시스템(100)에 걸쳐 압력 값들을 확립하도록 하나 이상의 펌프(도시하지 않음)에 연결된 하나 이상의 포트(도시하지 않음)를 포함한다. 예를 들어, 마이크로파/RF 플라즈마 영역(112), 화학적 이온화/드리프트 영역(136), 펌프식 드리프트 외측 챔버(124), 및 질량 분석기 모듈(148) 내의 압력 값들은 하나 이상의 펌프에 의해 유지된다.

[0064] 도 2는 질량 분석 시스템(예를 들어, 도 1의 시스템(100))을 위한 기상 시약 공급 조립체(200)의 단면도이다. 조립체(200)는 일관되거나 안정적인 유속 또는 수증기의 흐름을 에너지원에, 예를 들어, 도 1의 플라즈마 발생기(108)에 제공하도록 구성된다. 조립체(200)에 의해 제공되는 수증기는, 마이크로파 또는 RF 플라즈마에 의해 이온화될 수 있으며 때때로 기상 시약이라 칭하는 하나 이상의 시약 분자를 포함한다. 조립체(200)는 유체 공급원을 수용하기 위한 저장소(202)를 포함한다. 저장소(202)는 스테인리스 스틸 또는 기타 적절한 금속으로 구축될 수 있다.

[0065] 일부 실시예들에서, 저장소(202)는 수증기를 생성하도록 물 또는 순수를 수용한다. 도시한 바와 같이, 저장소(202)는 5개의 포트를 포함한다. 포트(204)는 유체를 저장소에 도입하기 위한 (예를 들어, 물이나 유체 공급을 중단하기 위한) 관 또는 채널에 접속가능하다. 포트(206)는 기상 시약을 질량 분석 시스템에 전달하거나 통과시키기 위한 관 또는 채널에 접속가능하다. 포트(208)는 저장소(202) 내의 유체에 관한 측정을 얻기 위한 관 또는 채널에 접속가능하다. 예를 들어, 포트(208)는 저장소(208) 내의 헤드스페이스 압력을 결정하도록 커패시터 압력 게이지에 연결될 수 있다. 일부 실시예들에서는, 포트(208)를 사용하지 않는다. 포트(216)는 저장소(202)의 유체의 양을 측정하기 위한 (예를 들어, 물 레벨 지시기에 접속하기 위한) 관 또는 채널에 접속가능하다. 포트(218)는 저장소(202)를 배수하거나 비우기 위한 관 또는 채널에 접속가능하다. 포트들(208, 216)의 각각은 선택 사항이며, 일부 실시예들에서는, 시스템(200)에 포함되지 않으며 또는 질량 분석 동작에 사용되지 않는다. 일부 실시예들에서, 포트들(204, 206, 208, 216, 218)의 각각은 직경 0.25인치(약 0.635센티미터)의 관들에 접속가능하다. 다른 크기의 관 또는 채널을 포트에 접속할 수 있으며, 관들 또는 채널들의 크기가 동일할 필요는 없다.

[0066] 일부 실시예들에서, 저장소(202)는 저장소(202)를 둘러싸는 히터 재킷(214)을 이용하여 특정한 상승 온도로 가열된다. 일부 실시예들에서, 도 1의 제어 모듈(152)은 열전대(212)에 연결된다. 저장소(202)(및 그 내부의 유체)의 온도는, 질량 분석 시스템의 동작에 응답하여 제어 모듈(152)에 의해 유지되고, 규제되고, 조절되는 동작 파라미터일 수 있다. 이러한 제어에 의해, 사용자는 액체면(210) 위의 헤드스페이스(213)의 기상 압력을 특정 값 또는 필요로 하는 값으로 유지할 수 있다.

[0067] 조립체(200)는 질량 흐름 제어기(224)에 유체 연통하는 배관(222)도 포함한다. 질량 흐름 제어기(224)는 배관(226)을 통해 플라즈마 영역(230) 내부로 흐르는 기상 시약의 양을 결정할 수 있으며, 상기 영역(230)에서 이러한 기상 시약에 마이크로파 또는 RF 에너지를 인가함으로써 시약 이온이 생성된다. 일부 실시예들에서, 질량 흐름 제어기(224)는 조립체(200)로부터 원격으로 위치하는 별개의 전자 부품들(도시하지 않음)을 구비하는 가열된 질량 흐름 제어기일 수 있다.

[0068] 다른 유형의 흐름 제어기를 질량 흐름 제어기(224)와 함께 또는 이 질량 흐름 제어기 대신에 사용할 수 있다. 도시한 바와 같이, 조립체(200)는 플라즈마 영역(230) 내의 압력 값을 가리키기 위한 게이지 또는 모니터(228)를 포함한다. 게이지는 용량 압력 게이지일 수 있다. 일부 실시예들에서, 도 1의 제어 모듈(152)은 게이지 또는 모니터(228)에 연결되고, 플라즈마 영역(230) 내의 압력은, 제어 모듈(152)에 의해 유지되고, 규제되고, 조절되는 동작 파라미터이다. 일부 실시예들에서, 게이지 또는 모니터(228)는 조립체(200)에 포함되지 않는다.

[0069] 일부 실시예들에서, 배관(222)과 관(226)은 스테인리스 스틸로 형성되고 약 0.25인치(약 0.635센티미터)의 외경을 규정한다. 관(229)은 조립체(200)의 본체를 플라즈마 영역(230)으로부터 전기적으로 분리한다. 일부 실시예들에서, 관(229)은 폴리테트라플루오로에틸렌(PTFE)으로 형성되고 약 0.25인치(약 0.635센티미터)의 외경을 규정한다. 플라즈마 반응 영역(230) 내의 압력은 질량 분석 동작 동안 약 1 내지 5 torr(약 100 내지 700 파스

칼)이다. 조립체(200) 내의 압력은 조립체(200) 외부의 펌프(도시하지 않음)에 의해 유지된다. 예를 들어, 도 1의 드리프트 외측 챔버(124)에 연결된 (그리고 이어서 화학적 이온화/드리프트 영역(136)에 연결된) 펌프를 이용하여, 조립체(200)와의 유체 연통을 통해 조립체(200)의 압력을 확립할 수 있다. 도 1의 화학적 이온화 영역(136)은 개구(122)와 플라즈마 영역/관(112)을 통해 조립체(200)와 유체 연통할 수 있다.

[0070] 일부 실시예들에서, 포트(220)는 마이크로파 또는 RF 에너지의 인가 동안 기상 시약을 다른 가스와 혼합하여 시약 이온 생산을 개선하는 데 사용된다. 예를 들어, 혼합 가스는 아르곤, 질소, 또는 아르곤/질소 혼합물일 수 있다. 일부 실시예들에서, 시약 이온 생성에서 사용되는 가스 또는 가스 혼합물(예를 들어, NO 또는 O_2)을 포트(220)를 통해 도입하고, 저장소(202)는 밸브(도시하지 않음)에 의해 배관(222)으로부터 유체적으로 분리된다.

[0071] 도 3은 시약 이온을 생성하기 위한 방법의 흐름도(300)이다. 단계(305)에서, 기상 시약이 공급된다. 예를 들어, 기상 시약은 비교적 일관되거나 안정된 기상 시약 흐름이 공급되도록 도 2에 도시한 시스템(200)에 따라 공급될 수 있다. 기상 시약은 순수한 수증기 또는 아르곤 또는 질소 또는 이들의 혼합물과 같은 플라즈마 혼합 가스와 혼합된 수증기일 수 있다. 일부 실시예들에서, 기상 시약은 아산화질소(NO) 또는 2가 산소(O_2)와 같은 시약 종들을 포함한다.

[0072] 단계(310)에서, 에너지를 기상 시약에 제공한다. 일부 실시예들에서, 에너지는 이온화된 마이크로파 플라즈마를 형성하는 데 사용되는 마이크로파 방사선이다. 일부 실시예들에서, 에너지는 고주파 RF 전력이며, 이는 예를 들어 용량성 결합 RF 에너지원에 의해 생성되는 유형의 RF 플라즈마를 형성하는 데 사용된다. 마이크로파 에너지는 일반적으로 약 800MHz 초과 약 300GHz 미만의 주파수 값을 갖는 전자기파에 의해 생성되는 에너지(예를 들어, 방사성 에너지)를 나타낸다. 고주파 RF 에너지는 일반적으로 약 400kHz 초과 약 800MHz 미만의 주파수 값을 갖는 전자기파에 의해 생성되는 에너지(예를 들어, 방사성 에너지)를 나타낸다. 구체적으로, RF 에너지는 ISM(Industrial, Scientific, and Medical) 무선 센터 대역 주파수에 의해 특정되는 주파수 값 내에서 제공될 수 있다.

[0073] 단계(310)에서 인가되는 에너지는 시약 이온을 생성하도록 기상 시약의 유속에서의 분자들을 에너지 공급하거나 여기한다. 기상 시약 스트림의 분자들은 플라즈마에 의해 이온화된다. 예를 들어, 수증기가 기상 시약으로서 사용되면, 히드로늄 이온들은 다단계 반응을 통해 생성된다.

[0074] $e^- + H_2O \rightarrow H_2O^+ + 2e^-$ - 반응식 1

[0075] $H_2O^+ + H_2O \rightarrow H_3O^+ + OH$ - 반응식 2

[0076] 반응식 1은 양으로 대전된 이온화된 물 분자 및 제2 자유 전자를 형성하도록 물 분자(H_2O)와 상호 작용하는 이온화된 플라즈마로부터의 자유 전자(e^-) 간의 상호 작용을 나타낸다. 반응식 2에서, 양으로 대전된 물 분자는 중성 물 분자와 상호 작용하여 히드로늄 이온과 수산기를 형성한다. 히드로늄 이온들은 유체 샘플의 구성 성분들과의 후속하는 상호 작용을 위한 시약 이온들일 수 있다.

[0077] 마이크로파와 고주파 RF 플라즈마 둘 다는, 시약 이온 종, 예를 들어, 히드로늄 이온을 생성하는 데 필요한 이온과 전자가 충분한 소스를 생성하는 효율적인 수단을 제시하기 때문에 바람직하다. 또한, 마이크로파와 고주파 RF 플라즈마는, 전극들이 플라즈마와 직접 접하는 속이 빈 음극/글로우 방전 플라즈마원에 종종 연관된 내부 스퍼터링이 없거나 거의 없어서 비교적 깨끗하다. 마이크로파와 고주파 RF 플라즈마원들의 "무전극" 성질은 전극 부식에 연관된 드리프트와 불안전성의 영향이 저감된다는 것을 의미한다. 또한, 마이크로파와 고주파 RF 플라즈마원들은 비교적 일정한 고 레벨의 시약 이온들을 제공할 수 있다.

[0078] 일부 실시예들에서, 도 3의 방법은 마이크로파와 고주파 RF 플라즈마의 압력을 측정하는 단계를 포함하는 추가 단계(도시하지 않음)를 포함한다. 플라즈마 압력 값은 질량 분석 시스템에 대한 제어 파라미터(예를 들어, 도 1의 제어 모듈(152)에 의해 제어 가능함)일 수 있다. 또한, 플라즈마 압력은 (예를 들어, 조립체(200)로부터의) 기상 시약의 적절한 공급을 결정하는 데 사용될 수 있다.

[0079] 도 4는 본 발명을 실시하는 질량 분석 방법(400)을 도시하는 흐름도이다. 단계(405)는 기상 시약을 제공하는 것이고, 단계(410)는 예를 들어 도 3에 대하여 전술한 바와 같이 마이크로파 또는 RF 에너지를 기상 시약에 제공하여 시약 이온을 생성하는 것이다. 이어서, 시약 이온들은 플라즈마 반응 영역과 화학적 이온화/드리프트 영역 간의 압력 강하로부터 발생하는 유체 흐름 현상 및 화학적 이온화/드리프트 영역 내의 전극들 또는 이온

추출 오리피스로부터의 전자기계 구배의 영향의 조합에 의해 화학적 이온화/드리프트 영역으로 향한다.

[0080] 단계(415)에서, 유체 샘플(예를 들어, 하나 이상의 휘발성 유기 화합물의 분자들을 함유하는 가스)은 시약 이온들과 상호 작용한다. 유체 샘플과 시약 이온들을 혼합함으로써 유체 샘플과 시약 이온들 간에 상호 작용이 발생한다. 예를 들어, 유체 샘플은 입구 라인을 통해 시약 이온들의 흐름에 공급될 수 있고, 드리프트 외측 챔버를 통과하여 화학적 이온화/드리프트 영역 내로 향한다. 샘플 공급과 화학적 이온화/드리프트 영역 간의 압력 강하는 유체 샘플을 화학적 이온화/드리프트 영역 내로 반송하는 유체 흐름을 용이하게 할 수 있다. 화학적 이온화/드리프트 영역은 자신 내에서의 시약 이온들의 이동을 용이하게 하는 전자기계를 포함하고, 시약 이온들과 유체 샘플의 구성 성분들 간의 충돌을 용이하게 한다. 시약 이온들과 유체 샘플의 구성 성분들 간의 충돌에 의해, 유체 샘플의 입자들을 이온화하는 화학 반응이 발생한다. 물의 친화도보다 큰 양자 친화도를 갖는 구성 성분 분자의 샘플 종(R)과 히드로늄 이온에 대한 화학 반응의 일례는 아래와 같다.

[0081] $$H_3O^+ + R \rightarrow RH^+ + H_2O$$ - 반응식 3

[0082] 히드로늄 이온과 종(R)에 대한 화학 반응은 저 에너지 및/또는 연성 이온화 상호작용이다. 예를 들어, 전자 충격 이온화와 같은 보다 높은 에너지 이온화 프로세스와 비교할 때, 샘플 분자들의 무결성은 현저하게 변경되지 않으며 샘플의 분자 분열(fragmentation)이 저감되거나 최소로 된다. 또한, 물의 친화도보다 작은 양자 친화도를 갖는 샘플의 종은 히드로늄 원자와의 충돌에 의해 이온화되지 않으며, 이에 따라 질량 분석 동안 검출되지 않는다. 이러한 종의 예로는, 2가 질소, 2가 산소, 아르곤, 이산화탄소, 메탄을 포함하는 공기의 공통 구성 성분이 있다. 일반적으로, 이러한 공기의 구성 성분들은, 미소량으로 샘플에 존재하는 구성 성분들에 관하여 샘플의 공기의 구성 성분들의 상당 부분에 기초하여 획득된 질량 스펙트럼에서 고 강도 스펙트럼 피크를 나타낸다. 고 강도 스펙트럼 피크는 근처의 저 강도 피크를 모호하게 할 수 있거나 저 강도 피크를 고 강도 피크로부터 구별하는 데 있어서 어려움을 증가시킬 수 있다. 따라서, 이러한 화학적 이온화 기술의 선택적 성질은 샘플에서의 저 강도/미소 레벨 종으로 인한 스펙트럼 피크들을 구별하는 기능을 향상시킬 수 있다.

[0083] 단계(420)에서, 시약 이온과 생성 이온은 렌즈 또는 출구 오리피스 조립체를 통해 화학적 이온화/드리프트 영역을 벗어나 질량 분석기의 컬렉터 영역으로 향한다. 일부 실시예들에서, 시약 이온과 생성 이온은 화학적 이온화/드리프트 영역에 확립된 전자기계에 의해 화학적 이온화/드리프트 영역을 벗어난다. 시약 이온과 생성 이온은 렌즈 조립체를 통해 이온 추출 오리피스를 통해 화학적 이온화/드리프트 영역의 단부에서 오리피스를 통과하여 질량 분석기 모듈 내로 향할 수 있다. 렌즈 조립체는 포커스 개구를 특징으로 할 수 있고 또는 3요소 아인젤 렌즈를 특징으로 할 수 있다. 일부 실시예들에서, 이온 추출 오리피스는 플랜지 내에 배치된다. 전위는, 시약 이온과 생성 이온이 이온 추출 오리피스를 통과하게 하는 전계가 생성되도록 렌즈 조립체와 이온 추출 오리피스에 인가될 수 있다. 일반적으로, 질량 분석기 모듈은 분자 흐름 상태가 질량 분석기와 이 분석기의 컴포넌트 부품들의 효과적인 동작을 주도하는 것을 보장하도록 비교적 고 진공에서 동작한다.

[0084] 질량 분석기 모듈은 사중극 질량 분석기 또는 비행시간형 질량 분석기를 포함할 수 있다. 어느 유형의 질량 분석기이든, 시약 이온과 생성 이온은 질량 분석기의 컬렉터 영역으로 향한다. 이온들은 컬렉터 영역에서 컬렉터와 충돌하고 그 결과 전류가 (예를 들어, 전자 증배관과 전치증폭기의 조합을 이용하여) 질량 분석기에서 증폭된다. 컬렉터로부터의 입력에 기초하여, 질량 분석기는 시약 이온과 생성 이온에 대한 데이터를 축적하고, 수집한 이온들의 양과 질량 값들(또는 질량 대 전하 비)을 나타내는 신호 스펙트럼을 생성한다.

[0085] 단계(425)는 예를 들어 생성된 질량 스펙트럼에 기초하여 시약 이온과 생성 이온의 질량과 양을 결정하는 것이다. 질량 스펙트럼에서의 분해 용이 피크들(Well-resolved peaks)을 이용하여 시약 이온과 생성 이온 둘 다의 정확한 질량 또는 질량 대 전하 비를 결정할 수 있다. 또한, 이러한 피크들의 정확한 위치는 스펙트럼 피크나 신호 피크로부터 결정된 질량 값 및 질량이 알려져 있는 이온이나 분자와의 비교에 의해 유체 샘플의 성분 식별을 용이하게 한다. 일부 실시예들에서는, 분석 모듈을 이용하여 신호 스펙트럼을 표시하고/하거나 스펙트럼에서의 피크들의 존재와 위치를 결정할 수 있다.

[0086] 도 5는 본 발명을 실시하는 사중극 질량 분석 시스템(500)의 단면도이다. 시스템(500)은 화학적 이온화/드리프트 영역(508)에 연결된 시약 이온 소스(504)를 포함한다. 시스템(500)의 시약 이온 소스(504)는 공진 공동(520)의 개구(516)를 통해 배치된 스터브 안테나(stub aerial; 514)를 갖춘 마그네트론(512)을 포함하는 마이크로파 에너지원에 기초한다. 일부 실시예들에서, 시약 이온 소스(504)는 RF 에너지원과 같은 고주파 에너지원에 기초할 수 있다. 또한, 시약 이온 소스(504)는 개구(528)를 통해 공진 공동(520)을 통과하는 관(524)을 포함한다. 또한, 관(524)은 공진 공동(520)의 외측면(536) 상에 배치되는 두 개의 마이크로파 초크(532)를 통과한다.

마이크로파 쵸크(532)는 공진 공동(520) 또는 관(524)을 탈출하는 마이크로파 에너지의 양을 저감하며, 시스템(500)의 다른 컴포넌트들로 연장되는 마이크로파 에너지를 저감한다. 관(524)은 실리카 또는 석영과 같은 실리카 물질로 형성될 수 있다. 일부 실시예들에서, 관(524)은 사파이어로 형성될 수 있다. 관(524)의 단부(540)는 기상 시약을 시약 이온 소스(504)에 제공하기 위한 기상 시약 공급원(도시하지 않음)의 대응 단부(도시하지 않음)에 연결될 수 있다. 예를 들어, 단부(532)는 도 2에 도시한 기상 시약 공급 시스템(300)의 관(229)에 연결될 수 있다.

[0087] 일부 실시예들에서, 관(524)은 약 6밀리미터의 외경을 갖는다. 공진 공동(520)은 y축을 따라 길이(l)를 규정한다. 길이는 공진 공동(520)의 최저차 공진 모드의 전체 일 파장(λ)과 대략 동일하거나 이에 대응한다. 관(524)은 공진 공동(520)의 상부(544)로부터 y축을 따라 약 ¼λ 의 거리에 위치한다. 보다 구체적으로, 관(524)은 공진 공동(520)으로부터 관(524)으로 전달되는 공진 에너지를 최대화하도록 공진 공동(520)의 안티 노드(anti-node)에 위치한다.

[0088] 일부 실시예들에서, 마그네트론(512)은 마이크로파 전력을 공진 공동(520)에 제공하는 스터브 안테나(514)를 갖는 900와트 마그네트론이다. 전력은 공진 공동(520)의 마이크로 스펙트럼의 주파수 값을 갖는 전자기파에 의해 방사성으로 분산되며 관(524)으로 전달된다. 관(524) 내측의 기상 시약과 상호 작용하는 공동(520) 내의 공진 에너지의 결과, 관(524) 내측에서 플라즈마가 발생한다. 기상 시약은 기상 시약 공급원에 연결된 단부(540)를 통해 관(524)으로 입력된다. 관(524)과 화학적 이온화/드리프트 챔버(508) 간의 압력 강하로 인해, 기상 시약 공급원은 기상 시약의 흐름을 제공하거나 또는 예를 들어 x축을 따라 관(524) 내부로 향하게 한다. 기상 시약의 연속 흐름은, 예를 들어 전술한 바와 같이 하나 이상의 시약 이온을 생성하도록 관(524) 내측에서 마이크로파 플라즈마가 유지되는 것을 보장한다.

[0089] 일부 실시예들에서, 공진 공동(520)은 밀폐된 단부(예를 들어, 공동(520)의 상부(544)와 하부(548))를 갖는 은으로 도금된 알루미늄 압출부로 구성된다. 일부 실시예들에서, 마이크로파 쵸크(532)는, 중심선이 x축에 평행하고, x축과 동축이며 또는 x축과 공선인 원통형이다. 마이크로파 초크(532)는 스테인리스 스틸 또는 알루미늄으로 형성될 수 있다. 일부 실시예들에서, 채널(533)은 마이크로파 쵸크(532)들 중 하나 또는 둘 다 내에 배치된다. 채널(533)의 길이는 y축을 따라 약 ¼ l 일 수 있다.

[0090] 관(524)의 제2 단부(552)는, 플랜지(560) 내에서 유지되며 화학적 이온화/드리프트 영역(508)에 부착되는 오리피스 판(556)의 면(557)에서 종단된다(도 6 참조). 시약 이온들은 오리피스 판(556)을 통해 관(524)으로부터 이동하여 화학적 이온화/드리프트 영역(508) 내로 향한다. 화학적 이온화/드리프트 영역(508)은 드리프트 외측 챔버(562)의 중심을 통해 x축을 따라 이격 배치된 환상 전극들(564)에 의해 부분적으로 규정된다. 전위는 전자기계를 생성하도록 전극들(564)의 각각에 인가된다. 일부 실시예들에서, 전자기계는 x축을 따라 선형 계 구배를 갖는다. 각 전극에 인가되는 양의 전위의 값은 축 방향으로 향하는 선형 계 구배를 생성하도록 x축의 양의 방향을 따라 감소된다. 비선형 계 구배를 이용할 수도 있다. 전극들(564)은 자신들 사이에 배치된 환상 절연 컴포넌트들(568)에 의해 서로 전기적으로 분리된다. 전계는 시약 이온 소스(504)(예를 들어, 관(524))로부터의 시약 이온 및 화학적 이온화/드리프트 챔버 포트(566)에서 도입되는 샘플 간의 상호 작용을 용이하게 한다.

[0091] 드리프트 외측 챔버(562)는 펌핑 시스템(580)에 연결된 펌핑 포트(576)도 포함한다. 드리프트 외측 챔버(562)는 샘플 도입선(도시하지 않음)을 위해 그리고 전체 압력 게이지(572)와 제2 게이지(도시하지 않음)와의 유체 연통을 위해 관 커넥터(도시하지 않음)를 갖는 포트(571) 및 전기적 피드스루 포트(도시하지 않음)도 포함한다. 일부 실시예들에서, 펌핑 시스템(580)은 다이어프레임 백킹 펌프(diaphragm backing pump; 도시하지 않음)를 구비하는 터보분자 펌프를 포함한다. 펌핑 시스템(580)은 드리프트 외측 챔버(562)와 화학적 이온화/드리프트 영역(508) 내에 필요한 압력을 확립한다. 화학적 이온화/드리프트 영역(508) 내의 압력은 전체 압력 게이지(572)에 의해 감시될 수 있고 드리프트 외측 챔버(562)의 압력은 제2 게이지(도시하지 않음)에 의해 감시될 수 있다. 이러한 게이지들에 의해 제공되는 데이터는 예를 들어 시스템 진단 프로세스를 위해 제어 모듈(도시하지 않음)에 입력으로서 공급된다.

[0092] 화학적 이온화/드리프트 영역(508)과 드리프트 외측 챔버(562)는 양면 플랜지(586)를 통해 질량 분석기(592)의 대응 플랜지(588)에 연결되는 플랜지(584)를 포함한다. 시스템(500)에 도시한 질량 분석기(592)는 사중극 질량 분석기이다. 질량 분석기(592)는 분석기 프로브(594)를 포함하며, 펌핑 시스템(596)과 유체 연통된다. 펌핑 시스템(596)은, 예를 들어, 시약 이온과 생성 이온의 질량 측정을 용이하게 하고 질량 분석기의 주변 성분과의 상호 작용으로부터 발생하는 이러한 이온 질량 측정의 부정적 효과를 저감시키도록 질량 분석기(592) 내의 압력

을 확립한다.

[0093] 화학적 이온화/드리프트 영역(508)으로부터 질량 분석기(592)로 전달되는 이온들은 이온 추출 전극(582)에 의해 질량 분석기 프로브(594)로 향한다. 일부 실시예들에서는, 이온 추출 전극(582)과 함께 이온 광학 조립체(도시하지 않음)를 이용하여 질량 분석기(592)로 전달되는 시약 이온과 생성 이온의 수를 증가시킬 수 있다. 예를 들어, 포커스 개구 또는 3요소 아인젤 렌즈를 이용할 수 있다. 분석기 프로브(594)는 전기적으로 바이어스된 사중극 질량 분석기 또는 질량 필터일 수 있다. 사중극 질량 분석기는 예를 들어 x축에 평행하며 정사각형의 꼭짓점들로서 배치된 네 개의 평행한 금속 로드(rod)를 포함한다. 로드들의 대향 쌍들은 두 개의 전기적으로 결합된 쌍극자를 생성하도록 전기적으로 연결된다. 양의 DC 전압 성분을 갖는 전압 또는 제1 RF 에너지는 제1 쌍극자의 로드들에 인가될 수 있고, 음의 DC 전압 성분을 갖는 전압 또는 제2 RF 에너지는 제2 쌍극자의 로드들에 인가될 수 있다. 질량 필터를 통한 안정 궤적 상에 있는 이온들은 일반적으로 로드들에 평행한(예를 들어, 정사각형의 중심축에 평행한) 방향으로 로드들 사이에서 이동한다.

[0094] 분석기 프로브(594)에 인가되는 RF 및/또는 DC 에너지는 질량 선택적 진동계(mass-selective oscillating field)를 생성한다. 질량 선택적 진동계에 의해, 일반적으로 x축을 따르는 방향으로의 발진 형상과 같은 특정 형상의 이온 궤적이 발생한다. 궤적은, 특정 범위를 벗어나는 이온들은 검출기(598)로의 궤적을 추종하지 않는 한편 그 특정 범위 내의 질량 대 전하 비의 값을 갖는 이온들은 실질적으로 검출기(598)로의 궤적을 추종하도록 특정된다. 비-선택 이온들은 로드들과 충돌하고, 검출기(598)에 의해 수집되지 않는다. 일부 실시예들에서, 질량 선택적 계는 사중극 로드들에 인가되는 에너지의 값, 예를 들어, 전위, DC 에너지, 또는 RF 에너지에 따라 가변된다. 질량 값들의 대역폭은 특정한 계 세기 또는 유속에 의해 선택될 수 있다. 또한, 분석기 프로브(594)는 질량 선택적 계를 가변함으로써 질량 범위를 검색할 수 있다.

[0095] 일부 실시예들에서, 분석기 프로브(594)는 삼중-필터 사중극 질량 분석기(triple-filter quadrupole mass analyzer)라 칭하는 일련의 세 개의 선형 동축 사중극을 포함한다. 이러한 실시예들에서, 삼중 필터의 제1 및 제3 실시예들은 비교적 짧은(예를 들어, 1인치 즉 2.54센티미터) "RF 전용" 필터이고, 이 필터는 제2 필터 또는 메인 필터에 의해 자신에게 투과되는 RF 전압 요소를 반송한다. 이러한 "RF 전용" 프리 필터와 포스트 필터는 이온 렌즈로서 기능하고, 질량 필터 조립체 내로 그리고 질량 필터 조립체 외부로 이온들을 포커싱한다. 이러한 식으로 프리 필터와 포스트 필터를 사용하는 것은 필터 조립체를 통한 이온 투과를 개선하기 위해서이며, 특히, 투과되는 이온들의 수를 증가시킴으로써 보다 큰 질량(예를 들어, 약 80원자 질량 단위를 초과하는 질량)의 이온 투과를 개선하기 위해서이다. 또한, 프리 필터와 포스트 필터는 필터의 다량 감도 성능 및 질량 분해능을 개선한다. 삼중 필터 조립체를 성공적으로 통과하는 이온들은 검출기(598)에 의해 수집된다. 일부 실시예들에서, 검출기(598)는 전자 증배관 검출기이다. 전자 증배관 검출기는 검출기(도시하지 않음)의 입구나 전면과의 이온 충돌에 의해 생성되는 전기 신호를 증폭한다.

[0096] 도 6은 도 5에 도시한 화학적 이온화/드리프트 영역(508)의 확대도이다. 화학적 이온화/드리프트 영역(508)은 추출 오리피스(616)를 규정하는 이온 추출 전극(612) 상에 장착 가능한 화학적 이온화/드리프트 챔버(620)를 포함한다. 시약 이온들은 플라즈마 영역(608)으로부터 화학적 이온화/드리프트 영역(508) 내로 이동할 때 추출 오피리스(616)를 통과한다. 이온 추출 전극(612)은 에너지원(도시하지 않음)과 유체 연통될 수 있다. 이온들은 이온 추출 전극(612)에 인가되는 전위에 의해 발생하는 전자기계의 영향 하에 추출 오리피스(616)를 통과한다. 이온 추출 전극(612)은 세라믹 삽입부 또는 다른 절연 물질로 형성된 삽입부를 갖는 하나 이상의 스크류(도시하지 않음)에 의해 플랜지(504)에 연결된다. 이러한 스크류와 삽입부는 이온 추출 전극(612)을 플랜지(604)로부터 더 전기적으로 분리하도록 절연(예를 들어, 세라믹 또는 PEEK) 칼라(collar; 614)를 통과한다. 일부 실시예들에서, 추출 전극(612) 상에 인가된 전위의 값은, 시약 이온들이 x축과 대략 평행한 중심선(A)을 따라 화학적 이온화/드리프트 영역(508)의 화학적 이온화/드리프트 챔버(520) 내로 향할 때 시약 이온들의 평균 에너지에 영향을 끼친다. 또한, 추출 오리피스(616)의 크기 및/또는 형상은 화학적 이온화/드리프트 챔버(620) 내로의 시약 이온들의 흐름의 양을 결정한다.

[0097] 이온들은 추출 전극(612)의 추출 오리피스(616)를 통과하여 (예를 들어, 축방향으로 또는 x축에 평행한) 대략 중심선(A)을 따라 화학적 이온화/드리프트 챔버(620) 내로 향한다. 전자기계는 드리프트 단부 판 전극(625)과 하나 이상의 판 전극들(624)의 각각(전극 스택이라고도 칭함)에 인가되는 전위에 의해 드리프트 영역(620)에서 생성된다. 전극들은 금속 물질 또는 기타 도전 물질로 형성될 수 있다. 일부 실시예들에서, 판 전극들(624)과 드리프트 단부 판 전극들(625) 각각은, 중심 오피리스(630, 633)가 중심선(A)에 정렬된 환 형상을 갖는다. 각 판 전극의 중심 오리피스(630)의 직경은 약 10 밀리미터이다. 드리프트 단부 판 전극의 중심 오리피스(633)의 직경은 약 1 내지 2 밀리미터이다. 다른 직경과 형상(예를 들어, 비원형)도 본 발명의 범위 내에 있다. 판 전

극들(624)과 드리프트 단부 판 전극(625)은 하나 이상의 절연 칼라(628)에 의해 물리적으로 분리되어 전기적으로 분리된다. 일부 실시예들에서, 절연 칼라(628)는 중심 오리피스(631)가 중심선(A)에 정렬된 환 형상을 갖는다. 절연 칼라(628)의 중심 오리피스(631)의 직경은 약 20밀리미터일 수 있다. 다른 직경과 형상도 본 발판의 범위 내에 있다. 절연 칼라(628)용으로 적절한-물질로는, 영국 랭카셔에 소재한 Victrex plc에서 판매하는 PEEK™로 형성된 칼라와 같은 폴리머 물질 또는 미국 펜실베니아주에 소재한 Quadrant Engineering Plastic Products of Reading에서 판매하는 정적 손실(static dissipative) 플라스틱이 있다. O-링(도시하지 않음)은 절연 칼라들(628)의 각각의 어느 한 측 상의 환상 홈 내에 위치한다. O-링은 절연 칼라와 판 전극(624)이나 드리프트 단부 판 전극(625) 간의 계면에서의 기밀 밀봉을 용이하게 한다. 일부 실시예들에서, 이러한 O-링들은 미국 델라웨어주 윌밍톤에 소재한 Du Pont Performance Elastomers에서 판매하는 VITON®

플루오로엘라스토머(fluoroelastomer)로 형성될 수 있다.

[0098] 추출 전극(612), 판 전극들(624), 및 드리프트 단부 판 전극(625)은 화학적 이온화/드리프트 챔버(620) 내에 전자기계를 생성하도록 협동한다. 일부 실시예들에서, 전자기계는 x축을 따라 선형계 구배를 갖는다. 또한, 전자기계는, 예를 들어, 추출 전극(612), 판 전극들(624)의 각각, 및 드리프트 단부 판 전극(625)에 인가되는 전위 간의 차이들에 기초하여 비선형일 수 있다. 전자기계는 시약 이온들을 제어하며, 유체 샘플의 구성 성분들과 시약 이온들 간의 상호 작용을 용이하게 한다.

[0099] 일부 실시예들에서는, 화학적 이온화/드리프트 챔버(620) 내에서의 시약 이온과 생성 이온의 흐름이 용이해지도록 x축을 따라 증가하는 방향으로 중심선(A)을 따라 판 전극들(624)의 각각과 드리프트 단부 판 전극(625)에 감소되는 전위를 인가한다. 샘플 가스는, 예를 들어, 드리프트 외측 챔버의 포트(예를 들어, 도 5의 포트(571))를 통해 그리고 나서 절연 칼라(628) 측의 포트(632)를 통해 도 1에 도시한 바와 같이 샘플 공급원(도시하지 않음)으로부터 화학적 이온화/드리프트 챔버(620)에 공급된다. 다른 절연 칼라(628) 측의 유사한 포트는 화학적 이온화/드리프트 챔버(620) 내에서의 압력 측정이 용이해지도록 도 5의 포트(571) 상의 게이지(572)와 유체 연통될 수 있다. 일부 실시예들에서, 샘플 공급원은 화학적 이온화/드리프트 챔버(620)에 입력되는 유체 샘플의 흐름을 제어하는 데 사용되는 질량 흐름 제어기로 구성된다. 샘플 가스는 x축을 따라 증가하는 방향으로 중심선(A)을 따라 진전되어 시약 이온과 상호 작용한다. 판 전극들(624)과 드리프트 단부 판 전극(625)은 추출 전극(612)에 고정되고, 이 추출 전극은 판 전극들(624)과 드리프트 단부 판 전극(625)을 화학적 이온화/드리프트 챔버(620) 내에서 지지한다.

[0100] 일부 실시예들에서, 제어 모듈(도시하지 않음)은 전극들(612, 624, 625)의 각각에 전위를 제공하도록 이온 추출 전극(612), 판 전극들(624)의 각각, 및 드리프트 단부 판 전극(625)에 연결된다. 또한, 제어 모듈은 계 구배, 압력, 또는 검출된 이온 강도와 같은 화학적 이온화/드리프트 챔버(620) 내의 다른 파라미터들을 감시한다. 특정 감시 파라미터에 대한 값이 소정의 임계값으로부터 벗어나면, 제어 모듈은, 이온 추출 전극(612), 판 전극들(624)의 각각, 및 드리프트 단부 판 전극(625)에 인가되는 전위에 대한 값을 리셋하거나 조절할 수 있다.

[0101] 일부 실시예들에서, 제어 모듈은, 피드백 루프를 통해, 화학적 이온화/드리프트 챔버(620)의 파라미터의 변경에 응답하여 이온 추출 전극(612), 판 전극들(624)의 각각, 및 드리프트 단부 판 전극(625)의 전위를 자동 변경한다. 예를 들어, 제어 모듈은 소정의 샘플 감시 요구 사항에 대한 최적의 e/n(예를 들어, 전하 밀도) 설정을 규정하는 압력 및 전계 구배를 초기 상태나 모드로서 확립할 수 있다. 일부 실시예들에서, 제어 모듈은 화학적 이온화/드리프트 챔버(620)의 파라미터들을 감시할 수 있고, 전계 구배 및/또는 압력의 실시간 조절을 통해 최적의 e/n 레벨들을 유지할 수 있다. 일부 실시예들에서, 제어 모듈은, 예를 들어, 서로 다른 e/n 레벨들을 이용하여 두 개의 동중 원소(iosbaric) 화합물들을 구별하는 경우, e/n 레벨의 사용자 유도 조절에 기초하여 화학적 이온화/드리프트 챔버(620) 계 구배 및/또는 압력 레벨에 변경을 가할 수 있다. 일부 실시예들에서, 이온 추출 전극(612), 판 전극들(624)의 각각, 및 드리프트 단부 판 전극(625)에 의해 확립되는 전계 구배는 x축을 따라 (또는 중심선(A)을 따라) 선형이다. 일부 실시예들에서, 전계 구배는 비선형이다. 제어 모듈에 의해 감시될 수 있고 화학적 이온화/드리프트 챔버(620) 내의 전계, 압력, 및/또는 e/n 레벨에 연관될 수 있는 다른 파라미터는 생성 이온 대 시약 이온의 비이다.

[0102] 드리프트 외측 챔버(562)는 질량 분석기(644)의 대응 플랜지(640)에 고정된 고정 플랜지(636)를 포함하며 이러한 양측 플랜지 사이에 양면 플랜지(648)가 배치된다. 추출 오리피스(656)를 규정하는 이온 추출 전극(652)은 예를 들어 하나 이상의 절연 스크류(660)에 의해 플랜지(648)에 고정된다. 절연 칼라(658; 예를 들어, 세라믹으로 형성됨)는 이온 추출 전극(652)을 양면 플랜지(648)로부터 전기적으로 분리한다. 금속 판(659)은 절연 칼라(658)를 차폐하고, 화학적 이온화/드리프트 챔버(620)와 질량 분석기(644) 간의 영역(657)에서 이온 광학에

간섭할 수 있는 표면 전하의 증강을 저감시킨다. 전위를 이온 추출 전극(652)에 인가하여, 화학적 이온화/드리프트 챔버(620)로부터의 시약 이온과 생성 이온이 질량 분석기(644)로 향하게 하는 계를 생성한다. 질량 분석기(644)는 진공 펌핑 및/또는 질량 분석기(644)와 분석기 프로브(664)의 철수가 용이하도록 하나 이상의 홀(668)을 갖는 분석기 프로브(664)를 포함한다. 분석기 프로브(664)는 중심선(A)에 대략 정렬되고, 이온들은 포커스 전극(676)을 통해 중심선(A)을 따라 분석기 프로브(664)에 입력될 수 있다. 분석기 프로브(664)는, 분석기 프로브(664)에 연결된 검출기(도시하지 않음)에 의해 수집되는 시약 이온과 생성 이온에 기초하여 질량 스펙트럼을 생성하고/하거나 표시하는 분석 모듈에 연결된다. 일부 실시예들에서는, 화학적 이온화/드리프트 챔버(620)와 질량 분석기(644) 사이의 영역에서 추가 이온 광학(도시하지 않음)을 이용하여, 예를 들어, 질량 분석기(644)에 도달하는 시약 이온과 생성 이온의 레벨을 최적화한다. 이온 광학은 3요소 아인젤 렌즈의 포커스 개구의 형태를 취할 수 있다.

[0103] 도 7은 본 발명을 실시하는 비행시간형 질량 분석기 시스템(700)의 평면도이다. 시스템(700)은 이온을 시스템(700)에 공급하기 위한 이온 소스(704)를 포함한다. 이온 소스(704)는 예를 들어 화학적 이온화/드리프트 영역(508)의 화학적 이온화/드리프트 챔버(620)로부터 생성 이온과 시약 이온을 공급할 수 있다. 이온들은 이온 흐름을 통해 이온 소스(704)로부터 비행시간형 질량 분석기(708) 내로 이동하게 된다. 이온들은 비행시간형 질량 분석기(708)로부터 전기적으로 분리된 이온 추출 전극(도시하지 않음)의 이온 추출 오리피스(도시하지 않음)를 통해 비행시간형 질량 분석기(708)에 입력될 수 있다. 전위를 이온 추출 전극에 인가하여, 비행시간형 질량 분석기(708) 내의 이온들을 제어하기 위한 전자기계를 생성할 수 있다.

[0104] 비행시간형 질량 분석기(708)는 비행 챔버(708) 내의 압력을 확립하는 펌핑 시스템(712)과 유체 연통된다. 이온들은 이온 렌즈들(720)의 세트를 포함하는 이온 광학 조립체(716)를 향한다. 하나 이상의 전위를 이온 렌즈들(720)에 인가하여, 이온 빔의 형상을 규정하고 제어하는 전자기계를 제공한다. 예를 들어, 이온 렌즈들(720)은 이온 흐름의 가능한 궤적을 구속하고 이에 따라 이온 흐름을 포커싱하거나 보다 적은 부피를 통해 이온 유속을 증가시킨다. 또한, 이온 렌즈들(720)은 속도 스펙트럼의 가변성 또는 이온들의 분산을 저감시킬 수 있다. 일부 실시예들에서, 이온 렌즈들(720)은 하나 이상의 DC 전위가 인가되는 사중극 렌즈들과 같은 정전 렌즈들이다. 이온 렌즈들(720)은 이온 흐름의 방향으로(예를 들어, 궤적(728)을 따라) 공간 가변성을 최소화하도록 이온 흐름과 상호 작용하는 포커싱 계를 생성한다. 광학 조립체(716)는 예를 들어 이온 유속, 모멘텀, 또는 이온 유속의 속도를 증가시키도록 이온 빔 또는 흐름의 특성들을 최적화할 수 있다. 빔 특성의 이러한 개선에 의해, 질량 스펙트럼의 분해능과 질량 스펙트럼의 피크 검출이 개선될 수 있다. 질량 스펙트럼의 피크들은 특정한 질량 값을 갖는 특정 이온들의 아이덴티티 또는 양을 나타낸다. 질량 스펙트럼의 분해능과 스펙트럼 피크가 개선됨으로써 피크들과 스펙트럼 또는 신호 잡음 간의 차별이 개선될 수 있다.

[0105] 이온들은, 이온 빔 조절기(724)를 향하여, 집중된 흐름에서 광학 조립체(716)를 벗어난다. 이온 빔 조절기(724)는 비행 영역(732)을 통해 궤적(728)을 따르는 이온들의 흐름을 인터럽트하거나 조절하는 쵸퍼 조립체일 수 있다. 일부 실시예들에서, 이온 빔 조절기(724)는 구동 시스템(도시하지 않음)에, 예를 들어, 이온 빔 조절기(724)의 파라미터들을 제어하는 디지털 전자 제어 모듈에 연결된다. 이 파라미터들은 특정 인터럽션이나 흐름 패턴에 따라 제어될 수 있다. 이러한 파라미터들은 이온 빔 조절기의 교번 와이어들에 인가되는 양의 전압과 음의 전압을 포함하고, 그 결과로 전압들이 인가될 때 이온 산란이 발생하고 이에 따라 전위가 인가되지 않을 때 궤적(728)을 따라 이온들이 (또는 펄스로서) 방해 없이 흐르게 된다. 일부 실시예들에서, 인가되는 양의 전압과 음의 전압의 크기는 최적의 성능을 위해 조절될 수 있다. 일부 실시예들에서, 구동 시스템은 특정 패턴, 예를 들어, 이온 빔 조절기 게이트가 특정의 시간을 두고서 반복적으로 열리고 닫히는 패턴에 따라 이온 빔 조절기(724)의 파라미터들을 제어한다. 또한, 구동 시스템은 의사 또는 비특정 패턴에 따라 이온 빔 조절기(724)의 파라미터들을 제어할 수 있다. 일부 실시예들에서, 구동 시스템은 궤적(728)을 따르는 이온들의 펄스화 흐름을 생성할 수 있는 의사 난수 이진 배열에 기초한다. 일부 실시예들에서, 이온 빔 조절기(724)는 예를 들어 특정 흐름 패턴에 따라 펄스화 이온 흐름을 생성하도록 급속히 전환될 수 있는 이온 게이트이다. 적절한 이온 게이트의 일례로는 Bradbury-Nielsen 게이트가 알려져 있다.

[0106] 이온들은 x축의 감소 방향으로 궤적(728)을 따라 그리고 제2 광학 시스템(736)을 향하여 이동한다. 광학 시스템(736)은, 이온들을 반사함으로써 궤적(728)의 방향에 영향을 끼치고 그리고/또는 이 궤적의 방향을 변경하는 리플렉트론(본 명세서에서는 부재 번호 736이라고도 칭함)일 수 있으며, 여기서 궤적(728a)의 경로는 궤적(728)의 경로와 대칭이며, 대칭축은 리플렉트론(736)의 중심을 통과한다. 일부 실시예들에서, 리플렉트론(736)은 반사된 궤적(728a)을 따라 이온 흐름을 반사 및/또는 경로 재설정하기 위한 정전 렌즈들의 세트(도시하지 않음)를 포함한다. 일부 실시예들에서, 리플렉트론(736)은 서로 본딩된 저항성 유리관으로 된 두 개의 섹션으로

이루어진다. 그리드(도시하지 않음)는 리플렉트론(736)의 전면(730)에 위치하고 제2 그리드(738)는 본딩된 두 개의 관 섹션 간에 위치한다. 고정된 전위를 전면(730)에서, 관의 두 개의 섹션 간의 그리드에서, 그리고 리플렉트론(736)의 후면(734)에서 그리드에 인가할 수 있다. 이러한 구성에 의해 전극 구배가 이온 반사를 위한 관 내에 확립될 수 있다. 이온들은, 광학 시스템을 벗어난 후, 검출기(740)까지의 반사된 궤적(728a)을 추종한다.

[0107] 광학 시스템(736)은, 예를 들어, 획득된 질량 스펙트럼의 신호 피크들의 분해능을 증가시키도록 이온들이 비행 영역(732)에서 이동하는 경로 길이(l)를 증가시키는 데 사용될 수 있다. 경로 길이(l)는, 예를 들어, 궤적(728)과 반사 궤적(728a)의 각각의 길이의 합에 기초하여 알려져 있는 값 또는 결정된 값을 가질 수 있다. 이온들이 경로 길이(l)를 횡단하는 데 필요한 시간량은, 시약 이온 또는 생성 이온에 대한 질량 또는 질량 대 전하 비를 결정하는 데 사용될 수 있다. 예를 들어, 경로 길이(l)를 횡단하는 데 필요로 하는 시간량은, 광학 시스템(716)에 의해 생성되는 전자기계의 영향 하의 가속 후, 비행 챔버(708)에서의 이온의 운동 에너지 또는 속도를 나타낸다. 이온이 경로 길이(l)를 횡단하는 데 소모되는 시간은 질량 또는 질량 대 전하 비를 결정하도록 로렌츠 힘 및 뉴튼의 제2법칙과 함께 사용될 수 있다. 또한, 광학 시스템(736)은 시약 이온과 생성 이온의 운동 에너지의 변동을 정정하는 데 사용될 수 있다. 비교적 높은 운동 에너지를 갖는 이온들은 비교적 낮은 운동 에너지를 갖는 이온들보다 (감소하는 x축 방향을 따라) 광학 시스템 내로 더 이동한다. 이러한 현상을 때때로 통과 또는 리플렉트론 통과라 칭한다. 궤적(728) 또는 반사 궤적(728a)의 초점에 또는 초점 근처에 검출기(740)를 위치시키는 것은 질량 스펙트럼에 대한 에너지 분포의 영향을 저감시킨다.

[0108] 이온 빔 조절기(724)의 서로 다른 펄스들로부터 비행 영역(732)을 통해 이동하는 이온들은 비행 영역(732)에서 혼합될 수 있어서, 검출기(740)에 의해 수신되는 신호에서 또는 검출기(740)에 의해 생성되는 질량 스펙트럼에서 신호 콘볼루션이 야기된다. 검출기(740)는, 질량은 동일하지만 광학 시스템(736)을 벗어나는 에너지가 서로 다른 이온들이 검출기에 의해 대략 동시에 수집되도록, 일반적으로 에너지 초점에 또는 에너지 초점 근처에 위치한다. 일부 실시예들에서, 검출기(740)는 적층된 마이크로채널 판형 검출기이다. 검출기(740)는 펄스 카운팅 모드에서 동작한다. 펄스 카운팅 모드는 개별적인 이온들이 비행 영역(732)을 통과한 후 검출기에 도달할 때 이러한 개별적인 이온들의 수집을 허용한다. 일부 실시예들에서, 검출기(740)는 신호 구별기, 증폭기, 및/또는 시간 대 디지털 변환기(TDC)와 함께 사용된다.

[0109] 이온 빔 조절기(724)가 의사 난수 이진 배열형 펄스화를 채용하면, 검출기(740)에 의해 수집되는 이온들로부터 획득되는 신호는 통계적 신호 처리 기술과 같은 신호 처리 기술을 이용하여 디콘볼루션될 수 있다. 통계적 신호 처리 기술은 콘볼루션된 신호 또는 스펙트럼의 통계 분석에 기초하여 신호 또는 스펙트럼에 관한 정보를 제공한다. 획득한 신호를 디콘볼루션하기 위한 적절한 신호 처리 기술의 일례로는 최대 우도 신호 처리가 있다.

[0110] 최대 우도 신호 처리는 통상적으로 측정된 이벤트에 기초하여 통계 계산을 수행한다. 예를 들어, i가 1 내지 N인 독립 변수(x_i)와 종속 변수(y_i)를 측정하기 위한 N개 이벤트의 집합에 대해서는, 측정된 데이터(x_i, y_i)로부터 합치 함수(fitting function)를 결정할 수 있다. 합치 함수는 i가 1 내지 m인 m개의 파라미터(ai)를 포함한다. 합치 함수는 $y(x_i) \equiv y(x_i; a_1, a_2,\ldots,a_m)$ 의 형태로 각 이벤트에 대하여 기입될 수 있다. 각 이벤트에 대하여, $y(x_i)$ 합치 함수는 정규화 확률 밀도 함수인 $P_i \equiv P(x_i; a_1, a_2,\ldots,a_m)$ 로 변환될 수 있다. 확률 밀도 함수(P_i)는 x_i의 관찰 값에서 계산될 수 있다. 우도 함수 $L(a_1, a_2,\ldots,a_m)$ 는 $L(a_1, a_2,\ldots,a_m) = \prod_{i=1}^{N} P_i$ 이도록 개별 확률 밀도들의 적(product)이고, 다양한 파라미터들(a_i)의 최대 우도 값들은 그 파라미터들에 대하여 우도 함수 $L(a_1, a_2,\ldots,a_m)$ 를 최소화함으로써 얻을 수 있다.

[0111] 일부 실시예들에서, 비행시간형 질량 분석기(700)는 콘볼루션된 신호 또는 스펙트럼을 생성하도록 이온 빔 조절기(724)의 의사 난수 이진 배열 펄스화를 이용하여 동작한다. 이어서, 콘볼루션된 신호 또는 스펙트럼은 최대 우도 신호 처리를 이용하여 디콘볼루션된다. 이 모드에서 사용시, 이온 빔 조절기(724)는 이온들이 전체 이용가능 시간의 약 50% 동안 통과할 수 있게 하고, 전체 이용가능 이온들의 약 50%가 비행 영역(732)을 통과할 수 있게 한다. 이러한 비행시간형 질량 분석기의 "높은 듀티 사이클" 동작은 향상된 신호 대 잡음, 개선된 감도 및 보다 넓은 동적 범위의 면에서 볼 때 성능 이점을 제공한다. 일부 실시예들에서, 비행시간형 질량 분석기(700)는, 이온 빔 조절기(724)의 단일 펄스로부터의 모든 이온들이 이온 빔 조절기의 후속 펄스가 트리거되기 전에 검출기(740)에 의해 수집되는 단일 펄스 모드에서 동작한다.

[0112] 비행시간형 질량 분석기(700)의 높은 듀티 사이클 동작에 의해 제공되는 이점에 더하여, 최대 우도 신호 처리도 다른 신호 디콘볼루션 방법에 비해 추가 성능 개선을 제공한다. 최대 우도 신호 처리는 신호 잡음을 가우스 잡음이 아닌 푸아송 잡음으로서 취급한다. 또한, 최대 우도 신호 처리는 실제 계기 응답 함수를 참조할 수 있으며, 예를 들어, 이상적인 계기 응답 함수가 아닌 실제 이온 빔 조절기 펄스 형상을 참조할 수 있다. 이러한 성능 개선은 신호 대 잡음 및 동적 범위의 추가 향상뿐만 아니라 증가된 신호 분해능도 용이하게 한다.

[0113] 일부 실시예들에서, 최대 우도 신호 처리는 데이터 분석 모듈(도시하지 않음)에 의해 수행된다. 또한, 데이터 분석 모듈을 이용하여, 예를 들어, 룩업 테이블 또는 단일변수나 다변수 확률법에 기초하여 질량 스펙트럼의 종을 식별할 수 있다. 일부 실시예들에서, 데이터 분석 모듈은 다변수 통계 분석에 기초할 수 있다. 적절한 다변수 통계 분석으로는, 예를 들어, Hotelling형 분석이나 DModX형 분석을 이용하는 주성분 분석 또는 부분 최소 제곱 판별 분석(PLS-DA)이 있다. 일부 실시예들에서는, 데이터 분석 모듈을 이용하여, 샘플 데이터를 해석하여 샘플이 특정 모집단과 연관 있는지를 결정한다. 일부 실시예에서, 데이터 분석 모듈은 시스템의 진단 출력을 감시하여 예를 들어 도 1의 시스템(100)과 같은 시스템에 결함이 발생하였는지를 결정한다.

[0114] 본 명세서에서 설명한 질량 분석 시스템 및 기술에 대한 많은 응용이 존재한다. 구체적으로, 미소 양이나 농도로 휘발성 유기 화합물을 검출할 수 있다. 미소 휘발성 유기 화합물을 실시간으로 검출하고 식별하는 증가된 감도 및 기능에 의해, 본 명세서에서 설명한 시스템과 방법에 대한 다양한 응용이 제공된다. 특정 응용으로는 가스(예를 들어, 환경 대기, 밀폐 공간으로부터의 가스, 가스 공급원으로부터의 가스, 고체 샘플이나 컨테이너로부터 방출된 가스, 또는 음식이나 음료 제품 위의 헤드스페이스의 가스)의 샘플링이 있다. 이어서, 샘플링된 가스를 가스 샘플 입구 포트에 도입하여 시약 이온들과 상호 작용시켜 생성 이온들을 형성한다. 휘발성 유기 화합물의 구체적인 응용 및 검출은 가스 샘플 입구 포트가 어떻게 그리고 어디에 위치하는지에 관련된다.

[0115] 일부 실시예들에서, 가스 샘플 입구 포트는 가스 샘플 입구 포트를 해당 분야의 요구에 맞추는 특정 응용 특징을 포함한다. 예를 들어, 의료 진단 분야에 있어서, 가스 샘플 입구 포트는 사람의 코와 입을 덮는 얼굴 마스크에 연결될 수 있다. 가스 샘플 입구 포트 또는 얼굴 마스크도 박테리아 필터를 포함할 수 있다. 입자들을 함유하는 환경으로부터 샘플링을 행하는 분야에서는, 예를 들어, 입자 필터를 샘플 라인 또는 가스 샘플 입구 포트 내에 통합해도 된다. 응결될 수 있는 종들을 기상 샘플이 함유하는 응용에서는, 히터를 시스템(예를 들어, 샘플 라인) 내에 통합하여 샘플 라인을 특정 온도까지 가열해도 된다.

[0116] 샘플 가스 컬렉터의 예로는, 가스가 가스 샘플 입구 포트 내로 전달되게 하는 출구 포트를 포함하는, 컨테이너, 용기, 또는 진공 기반 제품이 있다. 가스 컬렉터는 가스가 발견되는 환경에서 가스를 수집할 수 있고, 추후 분석을 위해 그 가스를 저장할 수 있으며, 이 경우 컬렉터는 비교적 가스가 침투할 수 없는 것이다. 일부 실시예들에서, 가스 컬렉터는 실시간 검출 및/또는 감시를 위해 가스 샘플 입구 포트 내로 그리고 드리프트 챔버 내로 공급을 행하는 출구 포트를 포함한다.

[0117] 이하에서 설명하는 질량 분석 시스템 및 방법을 위한 다양한 응용은 본 발명의 사상과 범위 내에 있다. 전술한 질량 분석 기술들을 위한 응용들 중 한 카테고리는 환경 대기를 포함하는 공기 중의 휘발성 유기 화합물의 미소 레벨 농도의 측정이다. 환경 대기는 (예를 들어, 가스 샘플 입구 포트를 환경 대기에 가깝게 위치시킴으로써) 밀폐 공간 또는 비-밀폐 공간으로부터 샘플링될 수 있다.

[0118] 휘발성 유기 화합물은 도시와 마을 내의 그리고/또는 산업 부지에 가까운 곳에서의 차량 방출 또는 오염 물질의 검출을 위해 도시 영역에서 감시될 수 있다. 이들은 때때로 인위개변적 VOC라 칭한다. 예를 들어, 산업 부지는 화학 공장, 폐기물 소각장, 철강 및/또는 시멘트 생산 시설을 포함할 수 있다. 산업 시설들은, 다이옥신 서로게이트 (및 다이옥신계 화합물), 푸란 (및 푸란계 화합물), 클로로페놀, 나프탈렌, 벤젠, 톨루엔, 에틸렌, 크실렌(통합적으로 BTEX라 함) 종들과 같은 VOC를 방출할 수 있다. 또한, VOC 또는 도시 유해 공기 오염 물질은, VOC 개시제 또는 비-메탄 유기 화합물 개시제와 같은 특정 프로그램에 응답하여, 미국의 Environmental Protection Agency 또는 다른 국가의 Ministry for the Environment(MfE)와 같은 규제 기관에 의해 식별된다.

[0119] 일부 실시예들에서, 가스 샘플 입구 포트를 폐기물 소각장 또는 굴뚝 근처에 위치시키는 것은 방출을 저감하기 위한 실시간 감시 및 조절(예를 들어, 실시간 피드백)에 유용하다. 이러한 실시간 감시는 연소 프로세스를 최적화하도록 그리고 스크러버의 정해진 효율을 확인하는 데에도 유용하다.

[0120] 일부 실시예들에서, 가스 샘플 입구 포트는 밀폐 공간에서의 공기 중의 VOC 함유량을 감시하도록 밀폐 공간에 위치한다. 밀폐 공간의 예로는, 빌딩 내, 차량 내, 그리고 항공기 선실이 있다. 가스는 환경 규제(예를 들어, 직업상 안전 및 건강 규제)의 고수를 확인하도록 작업공간 위치(예를 들어, 반도체 제조 시설 또는 공장의 청정

실)로부터 샘플링될 수 있다. 또한, 가스 샘플 입구 포트는 주변 공기 제어를 위해, "빌딩 증후군"을 조사하기 위해, 누수 빌딩을 비롯한 빌딩 물질의 열화를 검출하기 위해, 그리고 빌딩 내에서의 소비자 제품(예를 들어, 코팅과 물질에 의해 방출되는 연기)의 테스트를 위해, 건물의 공조 및 여과 시스템의 실시간 감시 및 검출에 사용될 수 있다.

[0121] 본 명세서에서 설명한 질량 분석법을 이용하여, 예를 들어 , 비도시(non-urban), 시골, 또는 원격 위치에 있는 숲 및/또는 식물이 방출하는 VOC를 감시 및 검출할 수 있다. 통상적으로, 이러한 유형의 VOC는 자연적(biogenic) VOC로 알려져 있다. 일부 실시예들에서, 가스는 (예를 들어, 오염 지역으로부터 또는 오염 지역 주위로부터 취해진 토양 샘플의 VOC를 테스트하도록) 토양 샘플을 함유하는 용기의 헤드스페이스로부터 샘플링된다. 질량 분석 기술은, 쓰레기매립지, (집중적인 동물 시료주기 작업을 포함하는) 가축 농장 지역, 및/또는 수계에 의해 방출되는 가스를 감시, 검출, 및 분석하는 데 사용될 수 있다.

[0122] 비-밀폐 공간에서는, 황화수소(H_2O)를 포함한 관심 대상인 방출이나 기타 가스의 VOC 함유량을 감시 및/또는 정량화하도록 자동차 또는 항공기 엔진 배기관으로부터 하측으로 가스 샘플 입구 포트를 위치시킬 수 있다. 본 명세서에서 설명하는 기술들은 대기 가스를 얻도록 가스 샘플 입구 포트를 위치시킴으로써 대기 화학 및/또는 대기 조성의 연구에도 적용가능하다. 이러한 가스들은, 동중 원소 화합물들을 포함할 수 있는 이차 유기 에어로졸의 형성으로 이어지는 광산화 프로세스 및/또는 기타 메커니즘을 연구하고 평가하도록 분석된다.

[0123] 본 명세서에서 설명하는 기술들은 음식 및 음료 산업에도 적용될 수 있다. 예를 들어, 음식이나 음료 제품 위의 헤드스페이스는 질량 분석법을 이용하여 분석될 수 있는 가스들을 함유한다. 헤드스페이스는 밀폐 공간(예를 들어, 밀봉된 컨테이너 내부) 또는 비-밀폐 공간에 있을 수 있다.

[0124] 음식 및 음료 응용의 예로는, 커피, 올리브 오일, 낙농 제품, (가금 및 돼지고기를 포함하는) 고기 제품, 생선 제품, 허브 및 양념, 맥주, 와인, 및 기타 알콜 음료와 같은 다양한 식품의 향기들 및/또는 아로마들의 감시, 식별, 및 그룹화가 있다. 가스의 향기들은 서로 다른 향기들에 기여하는 VOC 성분들에 기초하여 결정되고 그리고/또는 식별될 수 있다. 화학적 이온화 반응 및/또는 양자 전이 반응 질량 분석을 이용하여, 예를 들어, 음식에서의 박테리아 활동성의 결과로 생성되는 VOC의 분석을 통해 음식 부패 및/또는 상함을 감시할 수 있다. 본 명세서에서의 질량 분석법은, 제품 안전성과 유통 기한의 결정에 도움을 줄 뿐만 아니라 음식(예를 들어, 빵)의 신선도를 결정하고, 품질 보증과 품질 제어를 제공하는 데에도 사용될 수 있다. 질량 분석 기술들은, 혼합, 융합(blending), 로스팅, 쿠킹을 비롯한 음식 생산의 프로세스를 감시하고 특정의 일괄처리(batch) 음식이 유통이나 소비에 부적절한지를 결정하는 데 사용될 수 있다.

[0125] 음식 및 음료 산업 내에서는, 질량 분석을 이용하여 음식 패키징으로부터 음식 내의 오염 물질(예를 들어, 잔류 용매 또는 플라스틱 음식 패키징으로부터 발생하는 오염물)을 검출할 수 있다. 본 명세서의 질량 분석 기술들은 수용성 및 지용성 방부제 및/또는 다양한 음식들에서 사용되는 기타 음식 첨가물을 테스트하는 데 적용될 수 있다.

[0126] 화학적 이온화 반응 및/또는 양자 전이 반응 질량 분석기도 의료 및 건강관리 분야에서 진단이나 예측을 위한 계기로서 적용될 수 있다. 예를 들어, 가스 샘플 입구 포트는 인간의 호흡을 수집하여 질량 분석 시스템에 제공하도록 인간의 입에 가깝게 위치할 수 있다. 호흡의 VOC는 특정 질병의 존재 또는 환자 내의 물리적 상태를 나타낼 수 있다. VOC를 포함하는 호흡 분석의 응용은 여러 가지가 있다. 예를 들어, 특정 알칸이나 벤젠 유도체를 검출함으로써 호흡을 분석하여, 예를 들어, 폐암과 같은 암의 다양한 유형들을 검진할 수 있다. 또한, 폐결핵, 당뇨병, (예를 들어, 골수 환자의) 곰팡이 감염, 정신 분열증, 및/또는 조울증과 같은 기타 상태에 대하여, 이들의 환자의 호흡에서의 VOC 종과 양에 기초하여 호흡을 분석할 수 있다.

[0127] 또한, 본 명세서에서 설명하는 질량 분석법은 신장이나 기타 신장 기능을 감시하는 데 사용될 수 있다. 낭포성 섬유증을 겪는 인간의 호흡은 박테리아 감염이 존재할 때 특정 VOC를 포함할 수 있으며, 감염을 진단할 수 있다. 일부 실시예들에서, 인간의 호흡은 장기 이식 거부를 나타내는 특정 VOC를 포함한다. 또한, 인간의 호흡은, 전술한 분석법에 의해 검출될 수 있는 경기력 강화 약물을 미소 농도로 포함할 수 있다. 또한, 호흡 분석 및 VOC의 검출은 운동선수와 환자를 위한 다이어트와 식이 요법에 맞추도록 사용될 수 있다. 본 명세서에서 설명하는 질량 분석기를 이용하여 인간 호흡에 대한 VOC 분석을 행함으로써, 신진 대사의 평가와 감시, 및 갑상선 문제의 진단이 가능해진다.

[0128] 화학적 이온화 반응 및/또는 양자 전이 반응 질량 분석법은 보안, 바이오 보안, 과학 수사 및 범죄자 연구 분야에 적용된다. 예를 들어, 본 명세서에서 설명하는 시스템과 방법은, 폭발 물질, 화학 무기 작용제(CWA), 및/또

는 전장(battlefield) 가스, (방화 수사 시) 화재 촉진제, 시신의 위치를 감시하고 검출하는 데 사용될 수 있다. 또한, 가스 샘플 입구 포트는 인간 호흡을 수집하여 CWA나 전장 가스에 대한 노출을 검진하도록 위치할 수 있다. 질량 분석법은, 각기 다른 체액들(예를 들어, 범죄 현장에서 수집한 증거)의 특징인 특정 VOC를 검출하고 분석하는 데 사용될 수 있다. 본 명세서에서 설명하는 개념은, 호흡 분석을 통해 또는 남용 약물을 함유하는 것으로 의심되는 컨테이너에 가스 샘플 입구 포트를 연결함으로써 마약 및/또는 남용 약물의 검진 및 검출에도 적용가능하다. 더 일반적으로, 가스 샘플 입구 포트는 바이오 보안 위협을 가하는 물질이나 재료(예를 들어, 탄저병이나 포자)를 특징으로 하는 VOC를 검출하도록 선적 컨테이너 또는 패키지에 연결될 수 있다.

[0129] 또한, 전술한 기술들을 이용하여, VOC의 존재에 의해 입증되는 농업 해충과 병원균 오염에 대하여 농작물을 감시할 수 있다. 예를 들어, 가스 샘플 입구 포트는 곡물의 곰팡이 독소(진균독)의 존재를 검출하도록 곡물 근처에 위치할 수 있다. 또한, 화학적 이온화 반응 및/또는 양자 전이 반응 질량 분석을 이용하여 수확 후 (예를 들어, 음식 및 음료 생산 회사에 유통되기 전) 농작물의 곰팡이류 또는 곤충을 검출할 수 있다.

[0130] 화학적 이온화 반응 및/또는 양자 전이 반응 질량 분석 응용은, 예를 들어, 제품 개발 단계 동안 제품의 분석 및 테스트와 같은 화장품, 세면도구, 소비자 제약 산업에도 존재한다. 또한, 생산 프로세스 동안 질량 분석법을 채용하여 출시 전에 임의의 결함이나 결함 있는 제품을 검출할 수 있다.

[0131] 화장품, 세면도구, 소비자 제약 산업으로부터의 응용 예로는, 특정 향(예를 들어, 향수, 발한 억제제, 냄새 제거제)에 기여하는 VOC 성분의 식별에 기초하는 향 연구 및 개발이 있다. 본 명세서에서 설명하는 개념은 (예를 들어, 테스트 사용 중 또는 연구실 환경에서의 사용 중 VOC 함유량을 감시하고 VOC 레벨을 검출하도록) 세면도구와 소비자 제품의 개발 및 테스트에도 적용가능하다. 이러한 제품으로는, 구강 청결제, 치약, 비누, 살균 연고, 크림, 냄새 제거제, 발한 억제제가 있다. 구강 위생 제품도 호흡 분석을 이용하여 분석 및 감시될 수 있다. 음식과 음료 산업처럼, 화학적 이온화 반응 및/또는 양자 전이 반응 질량 분석은, 제품 안정성 및/또는 저장 수명의 평가를 비롯하여, 화장품, 세면도구, 소비자 제약 제품을 위해 일반적인 품질 제어 및/또는 품질 보장 프로그램에 사용될 수 있다.

[0132] 화학적 이온화 반응 및/또는 양자 전이 반응 질량 분석을 위한 추가 응용이 존재한다. 예를 들어, 설명한 개념은 발효 프로세스 동안 생성되는 VOC를 감시하고 식별하는 생물 약제 산업에서의 프로세스 감시 및 제어에 이용될 수 있다. 일부 규제 기관들(예를 들어, ASTM International)은 생물 약제품의 품질, 안전성, 효율을 개선하는 목표를 발표하였다. 제조 프로세스 동안 온라인 분석을 위해 샘플을 수집하도록 가스 샘플 입구 포트를 위치시키는 것은 이러한 규제 목표를 발전시킨다.

[0133] 일부 실시예들에서, 질량 분석법은 식물 잎 상해 및 방어 메커니즘에 연관된 VOC를 미소 농도로 검출하도록 생물학적 연구용으로 사용될 수 있다. 일부 실시예들에서, 가스 샘플 입구 포트는 예를 들어 탄화수소 기둥과 같은 가스 공급원으로부터 샘플을 수집하도록 위치한다. 공급 가스의 VOC 함유량은 전술한 방법들에 따라 결정된다. 탄화수소 기둥은 오일 및/또는 가스 피착물을 나타낼 수 있으며, 본 명세서에서 질량 분석 기술은 석유 탐사에 사용될 수 있다. 또한, 자동차 산업의 촉매 성능의 분석과 최적화에 있어서 화학적 이온화 반응 및/또는 양자 전이 반응 질량 분석을 이용할 수 있다. 이러한 응용에 있어서, 가스 샘플 입구 포트는 예를 들어 비교를 위해 전-촉매와 후-촉매 가스 종들 모두를 수집하도록 위치한다. 다른 응용은, 당업자에게 자명할 것이며, 본 발명의 사상과 범위 내에 있다.

[0134] 일부 실시예들에서는, 본 발명의 원리를 포함하는 분석기를 전자 코 시스템의 컴포넌트로서 사용한다. 일부 실시예들에서, 전자 코 시스템은 분석기에 의해 출력되는 신호들을 분석하기 위한 분석 모듈도 포함한다. 전자 코 시스템은 복수의 성분을 포함하는 고체 또는 액체 물질 위의 헤드스페이스에 있는 기체와 가스를 포함하여 기체와 가스를 분석하는 데 사용될 수 있다. 분석 모듈은 분석기에 의해 출력되는 신호들을 분석하고, 샘플 내의 특정 성분들을 식별할 수 있다. 또한, 분석 모듈은 존재하는 종들의 전체적 지문 분석을 수행하며(즉, 화학적 서명을 얻는다), 이는 이전에 저장된 정보의 다른 물질들로부터의 지문과 비교된다.

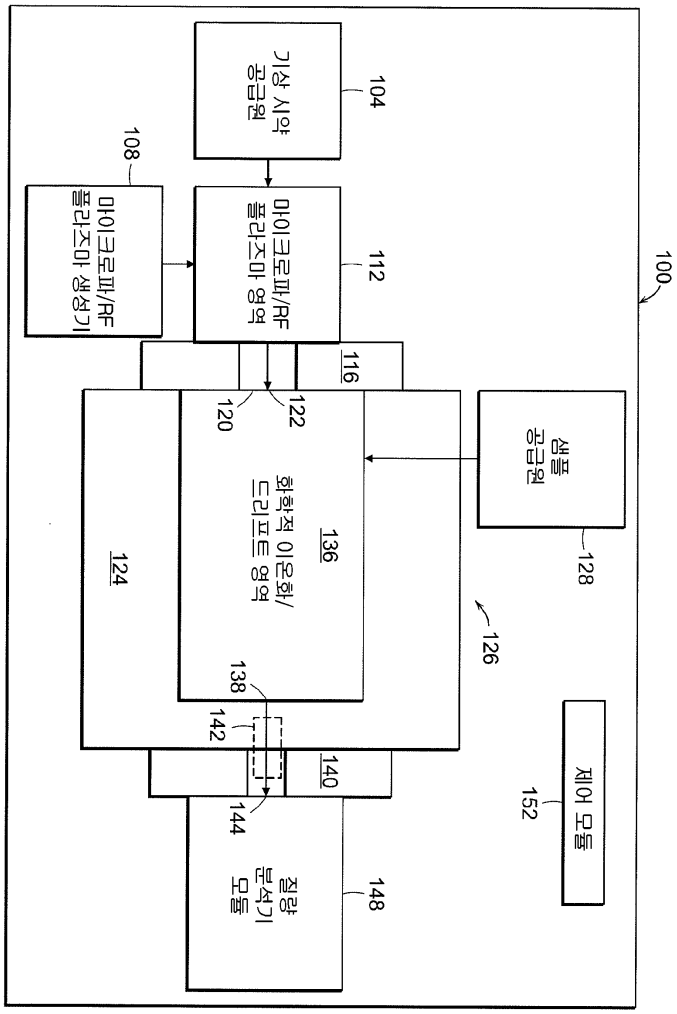
[0135] 일부 실시예들에서, 분석 모듈은, 예를 들어, 샘플들을 특징짓고 비교하도록 다수의 샘플 파라미터(예를 들어, 소정의 냄새와 향기를 특징짓는 많은 VOC 성분 피크)를 처리하는 데 특히 유용한, 다변수 분석 알고리즘, 패턴 인식 알고리즘 또는 신경망 알고리즘을 구현하는 컴퓨터 프로세서를 포함한다. 예를 들어, 다변수 분석 기술은 하나보다 많은 통계 변수의 관찰 및 분석에 유용하며, 간단한 비교를 행할 수 있도록 복잡한 지문으로부터의 데이터를 저감시킬 수 있다. 이 방안을 이용함으로써, 유사한 향기들과 냄새들을 그룹화할 수 있으며, 이상치(outlier)들을 식별하고 강조할 수 있다.

[0136] 흔히 대량의 성분(예를 들어, 복수의 서로 다른 VOC 종)으로 구성되는 음식과 음료에 의해 방출되는 VOC의 전체적 지문을 분석하는 데 전자 코 시스템을 사용하였다. 예를 들어, 냄새는, 각각이 특정한 크기와 형상을 갖는 분자들로 구성된다. 이 분자들의 각각은 인간의 코에 대응하는 크기와 형상의 수용기를 갖는다. 분석기를 이용하여 냄새 샘플 내의 서로 다른 많은 분자들을 고유하게 지문화할 수 있다. 전자 코 시스템에 대한 추가 응용으로는, 의료 진단을 위해 질병에 특정되는 냄새의 검출, 및 환경 보호를 위해 오염원과 가스 누출의 검출이 있다. 일부 실시예들에서, 전자 코 시스템은, 분석 모듈에 의해 분석되는 신호들을 출력하는 추가 센서들(예를 들어, 금속 산화물 반도체(MOS), 도전성 폴리머(CP), 석영 결정 미량 천평 및 전계 효과 트랜지스터(MOSFET) 센서들을 포함하는) 하나 이상의 가스 센서)을 포함한다.

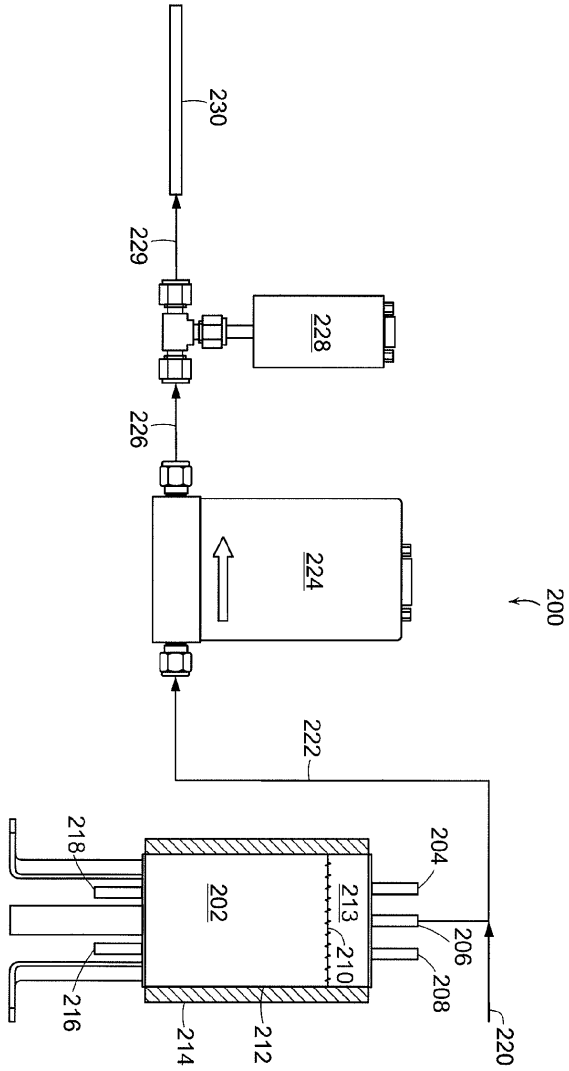
[0137] 특정 실시예들을 참조하여 본 발명을 설명하였지만, 당업자라면 청구범위에 의해 규정되는 바와 같이 본 발명의 사상과 범위로부터 벗어나지 않고 형태와 상세에 있어서 다양한 변경을 행할 수 있다는 것을 이해할 것이다.

도면

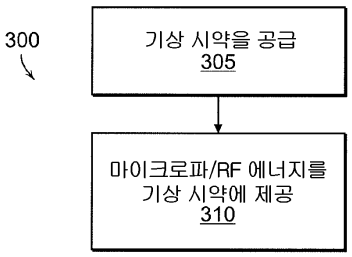
도면1



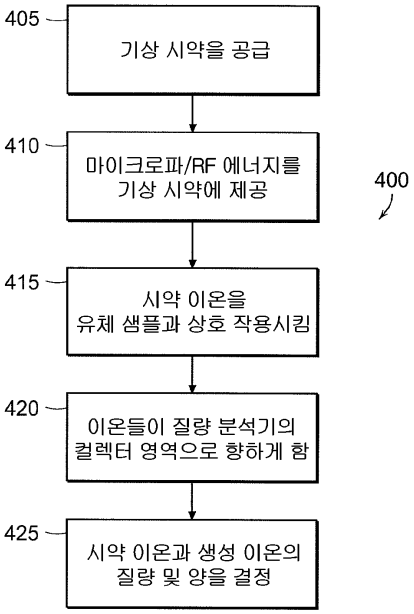
도면2


230
229
228
226
224
200
222
218
202
213
210
204
206
208
216
214
212
220

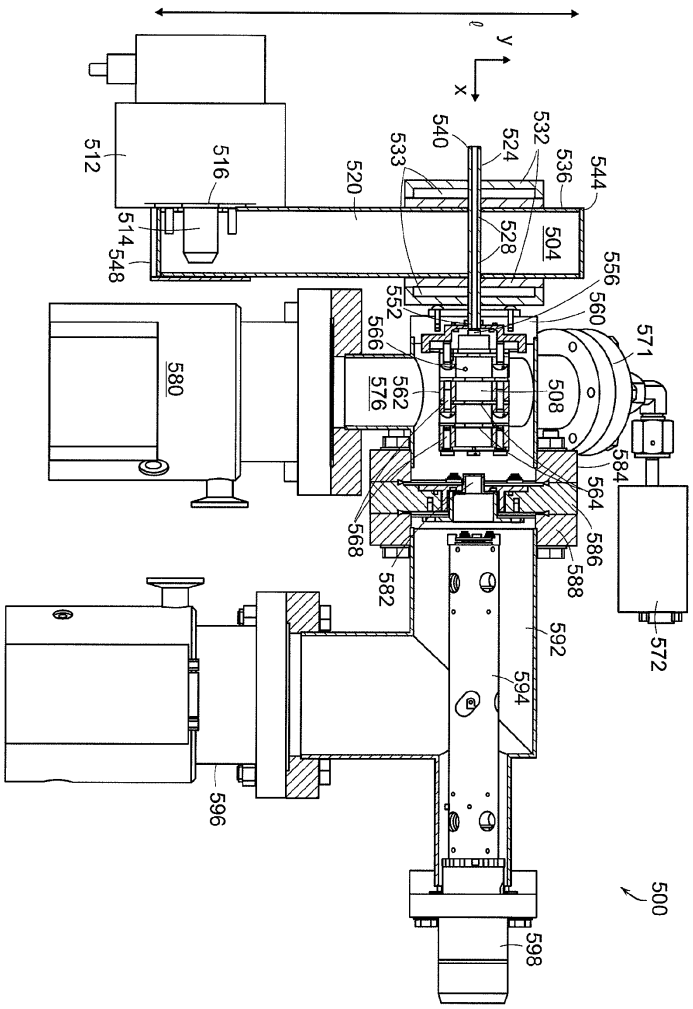
도면3


300
기상 시약을 공급
305
마이크로파/RF 에너지를
기상 시약에 제공
310

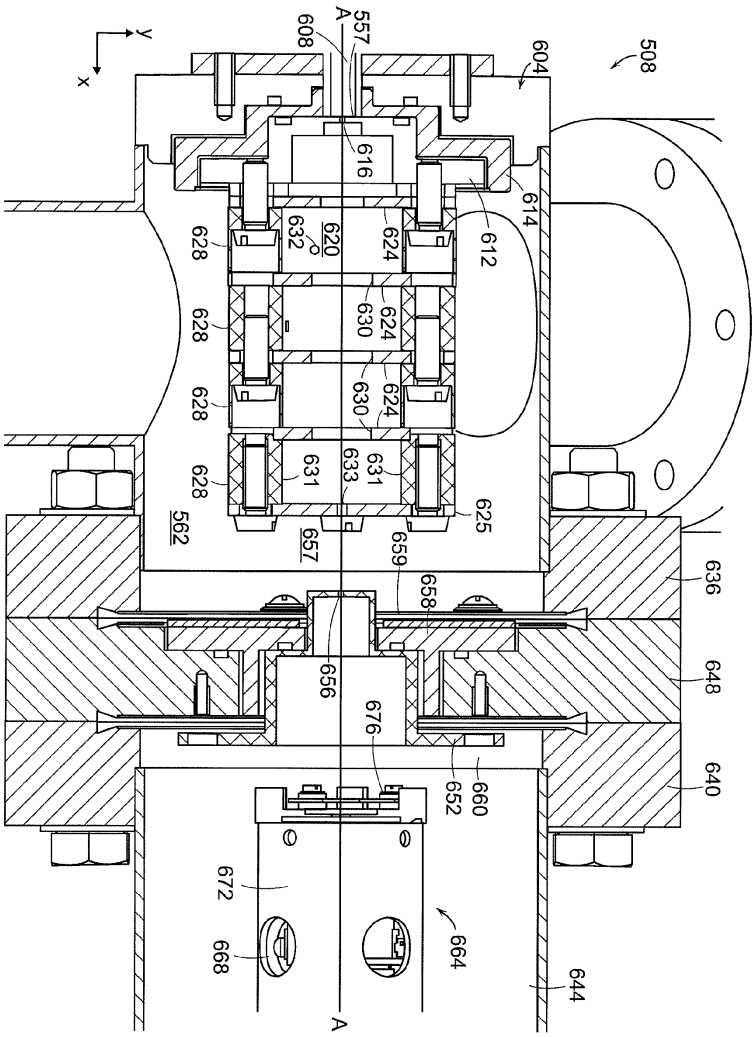
도면4


405
기상 시약을 공급
410
마이크로파/RF 에너지를
기상 시약에 제공
400
415
시약 이온을
유체 샘플과 상호 작용시킴
420
이온들이 질량 분석기의
컬렉터 영역으로 향하게 함
425
시약 이온과 생성 이온의
질량 및 양을 결정

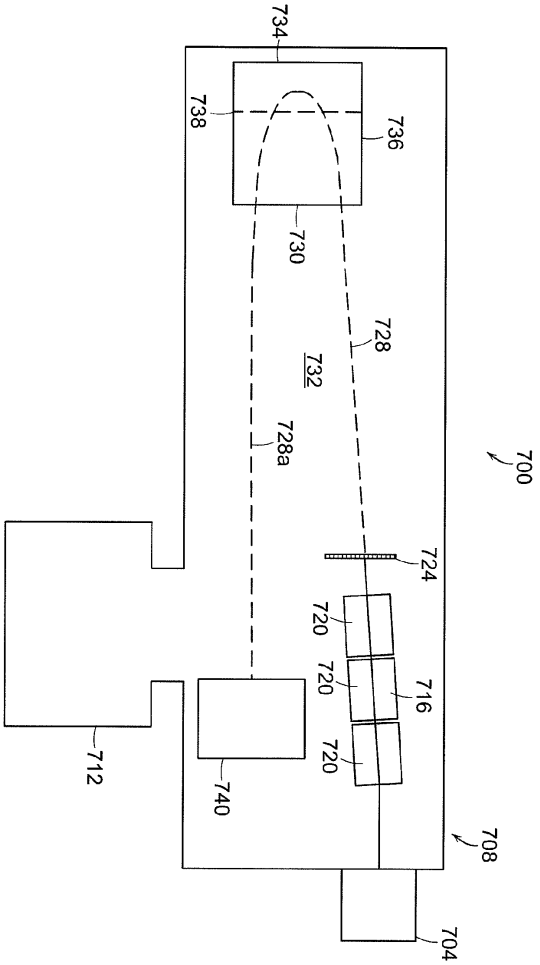
도면5


y
x
512
516
520
533
540
524
532
536
544
514
548
528
504
556
552
560
566
571
580
562
576
508
584
564
568
586
582
588
592
572
594
596
500
598

도면6


y
x
608
A
557
604
508
616
614
612
628
632
620
624
630
631
633
625
562
657
659
658
636
648
656
676
640
652
660
672
668
664
644
A

도면7


734
738
736
730
728
732
728a
700
724
720
720
716
720
712
740
708
704