



I282857

841620

發明專利說明書

(本申請書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：92119444

※申請日期：92年07月16日

※IPC分類：G01N²⁷/64, B01D⁵⁹/44, H01J⁴⁹/50

壹、發明名稱：

(中) 用於進行離子移動率譜術分析之差動法

(外) Differential methods for carrying out ion mobility spectrometry analyses

貳、申請人：(共 1 人)

1. 姓名：(中) 沙斯格特斯有限公司

(外) SAES GETTERS S.P.A.

代表人：(中) 1. 美希模 波特

(外) 1. DELLA PORTA, MASSIMO

地址：(中) 義大利米蘭拉納特維拉義大利路七十七號

(外) Viale Italia, 77, Lainate (Milano), Italy

國籍：(中英) 義大利 ITALY

參、發明人：(共 4 人)

1. 姓名：(中) 露卡 布斯特拉

(外) PUSTERLA, LUCA

地址：(中) 義大利米蘭阿基默德路四十二號

(外) Via Archimede 42, 20129 Milano, Italy

2. 姓名：(中) 安東尼奧 波納西

(外) BONUCCI, ANTONIO

地址：(中) 義大利米蘭奇耶利路八/M號

(外) Via Chiarelli, 8/M, 20151 Milano MI, Italy

3. 姓名：(中) 羅伯特 佐安那東尼歐

(外) GIANNANTONIO, ROBERTO

地址：(中) 義大利歐吉爾蒙特尼娜路九號

(外) Via Montagnina, 9, 28047 Oleggio NO, Italy

4. 姓名：(中) 瑪可 蘇奚

(外) SUCCI, MARCO

I282857

841620

地 址：(中) 義大利米蘭羅瑪娜可路九號

(外) Via Lo Monaco 9, 20131 Milano, Italy

肆、聲明事項：

◎本案申請前已向下列國家（地區）申請專利 主張國際優先權：

【格式請依：受理國家（地區）；申請日；申請案號數 順序註記】

1. 義大利 ; 2002/07/22 ; MI2002A 001616 有主張優先權

2. 義大利 ; 2002/07/29 ; MI2002A 001686 有主張優先權

I282857

841620

地 址：(中) 義大利米蘭羅瑪娜可路九號

(外) Via Lo Monaco 9, 20131 Milano, Italy

肆、聲明事項：

◎本案申請前已向下列國家（地區）申請專利 主張國際優先權：

【格式請依：受理國家（地區）；申請日；申請案號數 順序註記】

1. 義大利 ; 2002/07/22 ; MI2002A 001616 有主張優先權

2. 義大利 ; 2002/07/29 ; MI2002A 001686 有主張優先權

(1)

玖、發明說明

【發明所屬之技術領域】

本發明有關一種進行離子移動率譜術分析之差動法，尤其是同時分析極純氣體中所含之多種雜質，諸如微電子工業中所使用之氣體。

【先前技術】

離子移動率譜術於化學分析領域中簡稱為 IMS，亦表示用以進行該分析技術之儀器（離子移動率譜術儀器之簡稱）。

IMS 技術之重要性來自其極高之選擇性，同時降低設備之尺寸及成本。藉著於適當之條件下操作，可偵測氣體混合物中微微克量（pg，即 10^{-12} 克）或每兆濃度份數（ppt，等於每 10^{12} 個試樣氣體分子之所分析物質分子數）之氣體或蒸汽相物種；形成大部分氣體混合物之氣體從現在開始稱為「載體氣體」，而其混合物係稱為「試樣氣體」。

此種技術有許多應用領域，同時包括平民部分（尤其是偵測工業界清潔室中無機或有機污染物或工業廢棄物中之有毒物種）及軍事部分（尤其是偵測爆炸性或毒性物質諸如神經氣體之存在性）。IMS 分析方法及儀器係揭示於例如美國專利第 5,457,316 號、第 5,955,886 號及第 6,229,143 號。

IMS 儀器之一般幾何結構係出示於唯一之附圖中。該

(2)

儀器基本上係由一圓柱形艙室構成，其一末端具有試樣氣體（經由入口電極及離子化元件導入）入口，而相對末端具有一帶電粒子偵測器。該偵測器一般係保持於接地電位，而入口電極係保持於高於或低於該偵測器（個別為於正或負模式下操作之設備）之電位；其餘描述始終係使用正模式之 IMS 儀器，對應於最常使用條件，但所有此等考慮皆亦可使用於負模式。一可帶電柵條將該艙分隔成兩區，技術界稱為「反應區」（位於儀器入口側）及「漂移區」（位於該儀器之偵測器側）。一系列電極（通常為環形）沿兩區之牆排列，且設定於特定電壓下，以於入口電極與偵測器間產生一電場，其於該艙縱軸方向上係均勻，而將離子向粒子偵測器傳送。移動期間，該離子藉由通常與離子移動方向逆流之氣體減緩速度。此氣體係自位於艙末端之導管導入，且由位於相反末端之出口排出；該逆流氣體（技術界中稱為「漂移氣體」）係為與載體氣體相同或相異之超純氣體。

該離子化元件一般係為包含 ^{63}Ni 之 β 輻射來源。根據該操作模式，具有與入口電極之電荷相反之電荷的離子於其上中和，而具有與該電極同號之電荷的離子則進行排斥，且於反應區中加速。該第一離子化產物基本上係僅有載體氣體離子，因為其濃度較其他物質（通常為微量）大出數個位數；對應於載體氣體之主要離子於技術界中係稱為「反應物離子」。該反應區中，反應物離子之電荷係根據其電子或質子親和性、其離子化電位或其陰電性而根據

(3)

下述反應類型分佈於現存物質中：



其中 R^+ 係表示反應物離子， R 係為自該反應物離子之中和所衍生的中性分子（即，載體氣體分子）， S_i 係為第 i 種欲分析之物質的分子，且 S_i^+ 係為對應於 S_i 之離子；該離子 S_i^+ 經常因為與一或多種中性分子締合而產生錯合物物質，但為其簡易度且不喪失整體性而言，從現在起係意指簡單離子。

所有此等離子皆藉電場送向可帶電之柵條，通常係由直線且平行之導電性元件製得，尤其是金屬線。該柵條元件係分成兩交錯系列，使得一系列之各元件具有兩個另一系列的最近元件；該柵條之兩系列元件一般係個別施加高於及低於柵條電極電位的偏壓電位值。因此於柵條平面產生通常較該點的艙室縱軸電場強之橫向電場，使位於該反應區中之離子朝著構成該柵條之兩系列元件中之一加速前進而被中和；此等情況下，該柵條係「關閉」以防止離子通過飛向該漂移區。

欲進行該分析時，該兩系列柵條元件調至與該柵條電極相同之電位，以消除橫向電場；此等條件下，該柵條係「開啓」，使得該離子可行進進入該漂移區內。該柵條開啓通常持續數百微秒，此段時間內，位於該反應內之一部分離子行進至該漂移區內。尤其，該柵條被反應區中與該柵條相鄰之圓柱形體積中所含的一部分離子跨越，其高度係由以下關係式決定：

(4)

$$l_a = v_i \times t_a \quad (II)$$

其中 l_a 係為圓柱形體積之高度， v_i 係為離子化 S_i^+ 之移動速度，且 t_a 係為該柵條之開啓時間。該柵條開啓時間狹縫之起始或中心瞬時一般係假設為「時間零」，即分析開始。

在漂移區中，該離子以因軸向電場所致之加速及因與漂移氣體撞擊所致之減速所致的移動速度朝偵測器傳送。尤其，第 i 個離子之移動速度係與電場有線性關係，且根據下列兩項因素對於漂移氣體之黏度的影響，直接與溫度 T 成正比，而與壓力 P 成反比。雖然因為電場所致之加速對於具有相同電荷之離子的影響程度相同（但在 IMS 中，通常所有離子皆具有單一電荷），但減速係視不同尺寸、形狀及質量而以不同方式影響該離子，故各離子具有特性移動速度，而跨越漂移區之時間（技術界定義為「漂移時間」）通常異於其他離子。藉著記錄該偵測器上所收集之電荷，得到一術譜，包括以自試驗開始所經過之時間為函數所表示的離子電流波峰。該術譜中各波峰之強度係與導致該波峰而由離子 S_i^+ 所傳送之電荷 $C_{S_i^+}$ 的量成比例。

經由校正試驗（其中分析含有單一物質 S_i 之試樣氣體），可得到特定氣體於特定溫度及壓力條件下之離子性物質 S_i^+ 的數據，諸如速度及漂移時間，及該物質之反應 I 的效率。於理想狀況且於與校正試驗相同之條件下操作下，此等數據可使用於 IMS 分析，以根據波峰於該術譜

(5)

中之位置決定檢測下之氣體中的物質 S_i 的存在性，且根據不同波峰之相對大小決定其濃度。

然而，在實際分析時，情況遠較為複雜，因為有數個影響前述理論條件之現象。

第一個現象為可能存在無法預測且未知之物質 U_i ($i = 1, \dots, m$)，因此校正數據失效。此等物質可能根據反應類型以自離子 S_i^+ 或自離子 R^+ 抽取電荷而干擾分析：



結果係為離子 S_i^+ 之波峰及離子 R^+ 之波峰（於技術界定義為「反應物離子波峰」，簡稱 RIP，使用於下文中）具有低於理想狀況之強度或甚至可能消失的術譜，而有不具屬性之波峰。

此外，反應區中所形成之物質可能已於反應區或漂移區中與其他中性物質反應，反應類型為：



或



各根據各反應之不同動力學及平衡常數而於不同速度下進行至不同程度。此等反應導致達到該 IMS 儀器之偵測器的離子濃度相對於原先藉由與 R^+ 離子直接反應所形成之濃度而改變，使得對應於一物質之離子可能完全消失，而分析中再無法測得後者。可參考 G. A. Eiceman 及 Z. Karpas 所修訂之書籍 "Ion Mobility Spectrometry",

(6)

1994 年 CRC Press 出版，有關此等反應之複雜電荷轉移原理。

此外，來自例如先前分析之氣體如 O_2 、 CO 、 H_2 、 H_2O 等會存在 -- 化學性吸附或物理性吸附 -- 於該儀器之內表面（諸如該艙、電極等之內牆）。或此等氣體會溶解於構成該儀器之材料中，例如通常用以製得該艙之鋼材中，一般含有氫。此等氣體同時釋放於反應區及漂移區中。分析期間，其形成其他物質 B_i （ $i = 1, \dots, r$ ），進行第 I、III 或 IV 類反應。當此等反應係發生於反應區中時，自原先存在於試樣氣體中之物質移除電荷，而於最終術譜中出現偽波峰。相同反應當發生於漂移區中時，可能反而導致術譜扭變：實際上，與物質 S_i 之離子（皆同時進入漂移區中且始自相同位置（柵條））不同地，對應於此等物質之離子係於該漂移區之不同點上形成，因此根據所生成之點而於不同時間到達偵測器：結果如同理論所示，該儀器於術譜波峰間之讀數非零，而為非零「背景」，使得波峰面積之測定複雜化，或實際上無法得到具有較低強度之波峰。物質 B_i 之存在亦涉及其他缺點：首先，此等物質可能於漂移區中經由第 III 或 IV 類反應與基材 S_i^+ 反應，因此導致由物質 S_i^+ 傳送至偵測器之電荷量不當地衰減，結果降低儀器靈敏度；其次，基材 B_i 與物質 R^+ 於漂移區中之相互作用可能導致 RIP 不當地衰減，而降低該儀器之上限讀取臨限。

(7)

【發明內容】

因此本發明之目的係克服或至少將前述 IMS 分析之問題減至最少。

該項目的係使用主要特色係揭示於申請專利範圍第 1 項之方法達成，而其他特色係揭示於其餘申請專利範圍中。

【實施方式】

眾所周知 IMS 譜術基本上可解讀且充分分析，以得到所分析之氣體中的雜質物質濃度。然而，該解讀因為需要知道數項極難決定之參數而變得複雜化；尤其，在完全解讀 IMS 譜術時，應已知所有第 I 類反應之動力常數 K_{R-s_i} ，及所有第 III 及 IV 類副反應的動力常數 $K_{S_i-S_j}$ 及 $K_{S_i-U_j}$ 。各物質 S_i 之此等常數值可經由適當之校正方法得到，但需要極長且累贅的預備試驗。該問題通常係藉由基於在分析期間發生之現象進行假設而面對，例如，可忽略第 III、IV 及 V 類副反應或物質 B_i ；此情況導致計算之簡化，但係為在分析結果中導入誤差的估計。

本發明方法在於使用 IMS 儀自於兩試驗中改變一參數而進行兩連續分析，自所得之續術譜得到一系列數據（現在起定義為「主要數據」）成為分析之直接結果，該兩分析之主要數據使用於數學關係以得到兩方程式，各與兩連續分析中之一有關；藉由比較此兩方程式（尤其是彼此相除），可消去計算中未知之值或參數（在先前技術

(8)

方法通常被忽略者)；以速行導致分析之最終結果的計算，表示為該物質 S_i ($i = 1, \dots, n$) 中至少一者之濃度，其不受先前技術之估計問題所影響。當然，在本發明方法中，除了特意改變者以外的所有實驗參數於兩連續分析中皆保持不變。

於其第一實施例中，本發明方法在於該實驗條件下進行兩 IMS 試驗，以修飾離子性物質 S_i^+ 於 IMS 術譜儀器之反應區中的滯留時間。

在其實驗活性期間，本發明者決定由 S_i^+ 轉移至偵測器 D 上之電荷 $C_{S_i^+}$ 量可由下式表示：

$$C_{S_i^+} = [S_i] \times t \times \Delta \times K_{R-S_i} / \zeta \times \gamma^{-1} \quad (\text{VI})$$

其中：

— $[S_i]$ 係為物質 S_i 之濃度；

— t 係為離子 S_i^+ 於反應區 RZ 中之滯留時間，其可自已知量（諸如試樣氣體及漂移氣體之流速、反應區中電場強度、漂移區中電場強度、反應區長度、漂移區長度）計算；或 T 可自可量測之量（諸如離子 S_i^+ 之飛行時間）衍生；

— Δ 係為直接由離子化元件 IM 形成之電荷量 $C_{R,0}$ 與由離子 R^+ 傳送至偵測器 D 之電荷 C_R 之間的差值； Δ 等於反應物離子化所轉送之電荷，因此等於所有物質 S_i^+ ($i = 1, \dots, n$)、 U_i^+ ($i = 1, \dots, n$) 之總電荷，因此可藉由計算該術譜中存在之所有波峰下的面積（比較位於該基線下之面積），而自 IMS 分析產生之術譜得到，RIP 除

(9)

外；

— K_{R-S_i} 係為自離子 R^+ 電荷轉移至物質 S_i 之反應的動力常數（第 I 類反應）；

— ξ 等於 $\ln (C_{R,0}/C_R)$ ，且可由得知術譜中所存在之所有波峰的面積（包括位於基線下之面積）及僅有 RIP 之面積，而由來自 IMS 分析之術譜得到；

— γ 係為考慮介於物質 S_i 及所有物質 S_j^+ （ $j = 1, \dots, n; j \neq i$ ）、 U_j^+ （ $j = 1, \dots, m$ ）之間及介於物質 S_i^+ 及所有物質 S_j （ $j = 1, \dots, n; j \neq i$ ）、 U_j （ $j = 1, \dots, m$ ）之間的反應常數 K_{S_i} 及 $K_{S_i-U_j}$ （第 III、IV 或 V 類反應）； γ 亦考慮所有物質 S_j （ $j = 1, \dots, n; j \neq i$ ）、 U_j （ $j = 1, \dots, m$ ）之濃度，即除 S_i 之外之所有物質，啞包括（例如）物質 U_i 及 B_i ；因為 IMS 分析極為迅速，故進行本發明差動方法的完整試驗組花費數秒鐘時間，且可在本發明分析期間此等濃度保持固定之情況下進行估計；此等情況下，此函數假設一固定值。出現於方程式中之 γ^t 項中的指數 t 具有前文說明之意義。

方程式 VI 中， $[S_i]$ 係為欲於分析結束時決定之數據，因此非為操作人員可隨意修飾之參數； Δ 、 K_{R-S_i} 、 ξ 及 γ^t 各辭係表示所分析之系統中所存在之物質的特定化學反應性特色，因此亦非操作人員所能控制。相反地，分析操作人員可隨意修飾（在特定範圍內） $C_{S_i^+}$ 及 t 項，故此等係表示本發明方法之「控制參數」。

物質 S_i^+ 於反應區中之滯留時間可經由數種實際方法

(10)

修飾。第一種是於該兩試驗中改變該區中電場之值；此可依序藉由改變兩試驗中在整體儀器中之電場、或僅選擇性地修飾於 RZ 區中之電場而達成。第二種可能可使用供待審義大利專利申請案編號 M12002A001616 之標的的 IMS 儀器達成。如該義大利申請案所述，該儀器可控制施加於該儀自艙室中之電場，尤其是得到沿該艙之 x-軸具有不均勻型線之電場。不均勻電場之較佳類型係由 RZ 及 DZ 區中之兩相異電場的和構成；此等電場係個別稱為 E_{RZ} 及 E_{DZ} ，而以兩者皆均勻為佳。

考慮前述方程式 VI 之下，當電場 E_{RZ} 改變時， t 、 Δ 及 ξ 項之值改變，而 $[S_i]$ ($i = 1, \dots, n; j \neq i$)、 $[U_j]$ ($j = 1, \dots, m$)、 γ 及動力常數 K_{R-S_i} 、 $K_{S_i-S_j}$ 及 $K_{S_i-U_j}$ 項之值不變。因此，藉由使用兩不同電場 E_{RZ} 值進行兩試驗，針對藉物質 S_i^+ 傳送電荷至偵測器上之 $C_{1S_i^+}$ 及 $C_{2S_i^+}$ ，該兩電荷值可表示為：

$$C_{1S_i^+} = [S_i] \times t_1 \times \Delta_1 \times K_{R-S_i} / \zeta_1 \times \gamma^{t_1} \quad (\text{VII})$$

及

$$C_{2S_i^+} = [S_i] \times t_2 \times \Delta_2 \times K_{R-S_i} / \zeta_2 \times \gamma^{t_2} \quad (\text{VIII})$$

其中附加於方程式 VI 之下標 1 及 2 係表示使用不同電場進行之兩分析。藉著將方程式 VII 除以 VIII，可消去不變之項，因而得到：

$$C_{1S_i^+} / C_{2S_i^+} = (t_1 \times \Delta_1 \times \zeta_2) / (t_2 \times \Delta_2 \times \zeta_1) \times \gamma^{(t_1 - t_2)} \quad (\text{IX})$$

該 t_1 、 t_2 、 Δ_1 、 Δ_2 、 ξ_1 及 ξ_2 及 $C_{1S_i^+} / C_{2S_i^+}$ 比例可得

(11)

自該兩術譜；如此，自方程式 IX 得到 γ 之值，其可使用於方程式 VI 中，以推導 $[S_i]$ ，而不需知道反應常數 $K_{S_i-S_j}$ 及 $K_{S_i-U_j}$ 。

亦可藉由修飾介於試樣氣體流速 F_C 與漂移氣體流速 F_D 之間的比例，或藉由修飾反應區之長度，而得到極相同之效果（即，修飾離子 S_i^+ 於該 RZ 中之滯留時間）。 F_C/F_D 比例之修飾可藉由控制進料試樣氣體及漂移氣體之氣體管線中的流動而輕易得到；此可簡易地使用針閥、質流計或熟習此項技術者已知之類似裝置完成；使用此方法時，兩試驗中僅能改變一或兩流速。RZ 長度之修飾可例如藉由於該術譜儀艙室中，沿著該儀器軸的不同點上配置兩（或多個）柵條，且藉由選擇性啓動該兩柵條中之一，即藉由於不同試驗中交替「開啓」該兩柵條中之一而得到；配置有兩柵條之 IMS 儀器係自例如美國專利第 5,200,614 號得知，但此專利中，兩柵條之存在係因不同因素而於不同方式下使用，即用以於具有基本上零電場之儀器中產生一區域。因為效果如同改變 E_{RZ} 所得，故該分析方法亦相同，即，採用方程式 VII 至 IX 以得到 γ 值，隨之用於方程式 VI 中以評估物質 S_i 之濃度。

本發明差動方法之第二實施例係於施加於漂移區的兩不同電場值 E_{DZ} 下進行兩不同試驗，比較所得之結果。電場 E_{DZ} 之時間變化可解決因為該漂移區中於離子 S_i^+ 與儀器內部零件釋出之物質 B_i 間發生之次要反應所致的非理想性。本發明者發現由離子 S_i^+ 傳送至偵測器 D 之電荷

(12)

(以下表示為 C_{A,S_i^+}) 係與離子 S_i^+ 於柵條 G 開口進入漂移區 DZ 的電荷量 (以 $C_{S_i^+}$ 表示) 具有以下關係:

$$C_{A,S_i^+} = C_{S_i^+} \times \lambda^{-1} \quad (\text{X})$$

其中 λ 係為考慮電荷轉移常數、介於離子 S_i^+ 與構成儀器內部零件之材料所釋出之不同附加物質 B_j 間的 $K_{S_i-B_j}$ 、及此等物質之濃度 $[B_j]$ ($j=1, \dots, r$) 的函數。藉著於不同時間狹縫下進行兩試驗, 於兩試驗中使用不同電場, 可得到以下兩關係式:

$$C_{1A,S_i^+} = C_{S_i^+} \times \lambda^{-t_1} \quad (\text{XI})$$

及

$$C_{2A,S_i^+} = C_{S_i^+} \times \lambda^{-t_2} \quad (\text{XII})$$

此等關係試中之符號的意義係與關係試 VII 及 VIII 中的符號相同。

藉著將方程式 XI 除以 XII, 得到下列方程式:

$$C_{1A,S_i^+} / C_{2A,S_i^+} \times \lambda^{(t_1-t_2)} \quad (\text{XIII})$$

由其藉著測量術譜中之時間 t_1 及 t_2 而得到 λ , 且自與物質 S_i^+ 有關之波峰的面積得到 C_{1A,S_i^+} 及 C_{2A,S_i^+} ; 一旦已知 λ , 藉由測量 C_{1A,S_i^+} , 可自關係式 X 推導出 $C_{S_i^+}$ 之值, 因此可自關係試 VI 推導出試樣氣體中之物質 S_i 濃度值。

於其第三實施例中, 本發明方法係於修飾 $C_{S_i^+}$ 值之實

(13)

驗條件下進行兩 IMS 試驗。此情況下，需要針對各物質 S_i 進行一對試驗，以進行完全之試樣氣體分析；然而，第一試驗可共用於所有試驗對。 C_{Si^+} 值可藉由添加已知濃度之物質 S_i 於該試樣氣體中而修飾。此等條件下，由第 I 種物質傳送至偵器測 D 之電荷量可針對兩試驗個別由此等方程式描述：

$$C_{1Si^+} = [S_i] \times t_1 \times \Delta_1 \times K_{R-Si} / \zeta_1 \times \gamma^t \quad (\text{XIV})$$

及

$$C_{2Si^+} = ([S_i] + x) \times t \times \Delta_2 \times K_{R-Si} / \zeta_2 \times \gamma^t \quad (\text{XV})$$

其中 x 係表示添加於第二試驗之物質 S_i 的已知濃度。

此情況下，第 I 種物質於反應區中之滯留時間保持不變，故於方程式 XIV 及 XV 中，此參數不具有下標 1 及 2。以下方程式係藉著將方程式除以 XV 而得到：

$$C_{1Si^+} / C_{2Si^+} = [S_i] / ([S_i] + x) \times (\Delta_1 \times \zeta_2) / (\Delta_2 \times \zeta_1) \quad (\text{XVI})$$

此情況下， C_{1Si^+} 、 C_{2Si^+} 、 Δ_1 、 Δ_2 、 ζ_1 及 ζ_2 之值係得自與兩試驗有關之術譜；因為 x 項係已知，故唯一未知量僅有 $[S_i]$ ，其因此可輕易得自先前方程式。

本發明方法因而可克服先前技術之 IMS 術譜的解讀問題，避免知道在該儀器艙中所發生之所有關反應及所有相關動力常數的需要、及解出包括數量等於第 I 類之主要

(14)

反應及第 III、IV 或 V 類次要反應之數量的方程式矩陣之需要。綜合此等數據（可經由複雜校正方法完成）會導致極為繁瑣之方法。此外，在亦進行校正下，無法考慮第 III 類反應，即於實際分析條件下與無法預期或未知物質發生之反應。尤其，所述之該第一及第三實施例可解決該技術因為存在第 III、IV 及 V 型次要反應所致之非理想化問題，而所述之第二實施例則解決因為儀器艙中存在 B_i 類物質所致之非理想性問題。

於本發明方法任何實施例中，表現出分析結果之術譜較佳係自動地藉具有微處理器之適當已知可程式化控制單元處理，但如配置有適當之界面的電腦；得到操作人員可如前述用以得到物質 S_i ($i = 1, \dots, n$) 濃度的 $C_{1S_i^+}$, $C_{2S_i^+}$, C_{1A,S_i^+} , C_{2A,S_i^+} , t_1 , t_2 , Δ_1 , Δ_2 , ζ_1 和 ζ_2 值的自動分析結果主要數據。就較佳備擇例而言，分析該術譜以生成主要數據之相同單元係使用此等相同數據，以處理方程式 VI 至 XVI，而直接提供物質 S_i 之濃度值。

【圖式簡單說明】

圖 1 係為 IMS 儀器之一般幾何結構。該儀器基本上係由一圓柱形艙室構成，其一末端具有試樣氣體（經由入口電極及離子化元件導入）入口，而相對末端具有一帶電粒子偵測器。該偵測器一般係保持於接地電位，而入口電極係保持於高於或低於該偵測器（個別為於正或負模式下操作之設備）之電位；其餘描述始終係使用正模式之 IMS

儀器，對應於最常使用條件，但所有此等考慮皆亦可使用於負模式。一可帶電柵條將該艙分隔成兩區，技術界稱為「反應區」（位於儀器入口側）及「漂移區」（位於該儀器之偵測器側）。一系列電極（通常為環形）沿兩區之牆排列，且設定於特定電壓下，以於入口電極與偵測器間產生一電場，其於該艙縱軸方向上係均勻，而將離子向粒子偵測器傳送。移動期間，該離子藉由通常與離子移動方向逆流之氣體減緩速度。此氣體係自位於艙末端之導管導入，且由位於相反末端之出口排出；該逆流氣體（技術界中稱為「漂移氣體」）係為與載體氣體相同或相異之超純氣體。

元件符號對照表

C	實質圓柱形之艙室
IC	供試樣氣體使用之入口
ER	入口電極
D	偵測器
G	柵條
RZ	反應區
DZ	漂移區
E_i ($i = 1, \dots, n$)	電極
SG	簾柵 SG
E_g	柵電極
DC	末端之入口

I282857

(16)

OC 出口

x 艙室 C 之縱軸

E_{RZ} 反應區電場

E_{DZ} 漂移區電場

伍、中文發明摘要

發明名稱：用於進行離子移動率譜術分析之差動法
一種使包含一或多種物質 S_i 、 S_j 、 \dots S_n 之氣體藉離子移動率譜術進行分析的方法，其係於不同條件下進行兩個連續之分析，且比較此兩分析之結果；該兩分析之不同條件係諸如修飾該離子移動率譜術儀器之反應區或漂移區中對應於該物質之離子的滯留時間，或選擇性地修飾此等離子中至少一種的濃度。

陸、英文發明摘要

發明名稱：

DIFFERENTIAL METHODS FOR CARRYING OUT ION MOBILITY
SPECTROMETRY ANALYSES

Methods for carrying out analyses of a gas comprising one or more species S_i , S_j , ..., S_n by means of ion mobility spectrometry consisting in carrying out two subsequent analyses in different conditions and comparing the results of these two analyses; the different conditions in the two analyses are such as to modify either the residence time of the ions corresponding to said species in the reaction zone or in the drift zone of the ion mobility spectrometer, or, selectively, the concentration of at least one of these ions.

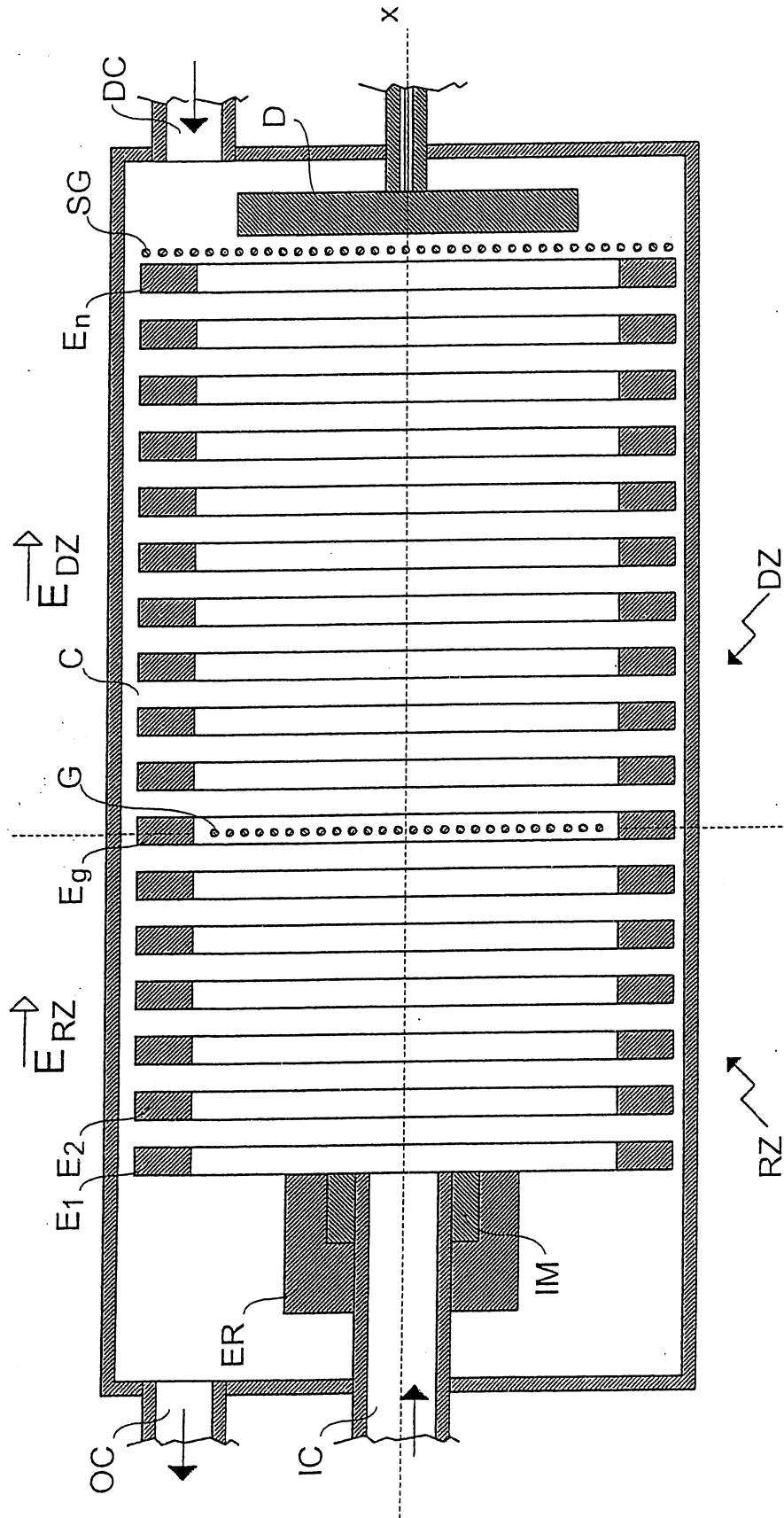


圖1

柒、(一)、本案指定代表圖為：第_____圖

(二)、本代表圖之元件代表符號簡單說明：

無

捌、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

本案指定代表化學式為：第_____化學式

無

(1)

修正替換頁
 96年3月15日

拾、申請專利範圍

1. 一種藉離子移動率譜術進行包含一或多種物質 S_i ($i = 1, \dots, n$) 之氣體的分析之方法，其包括下列步驟：

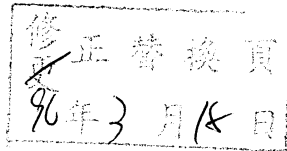
- 使用第一組實驗參數值進行第一試驗；
- 使用第二組實驗參數值進行第二試驗，使得離子移動率譜術儀器在選自產生離子 S_i^+ ($i = 1, \dots, n$) 之物質濃度 $[S_i]$ 、該等離子於反應區之滯留時間或該等離子於漂移區之滯留時間中的一參數異於該第一組對應參數之值；
- 將該兩試驗中所得之數據用在顯示由第 i 種離子轉移至該術譜儀器之偵測器的電荷 $C_{S_i^+}$ 作為試驗參數之函數的關係中，以得到兩方程式；
- 將兩方程式彼此相除，消去計算不變之參數，並因該除法之結果得到至少一參數，可再導入該兩式之各式中，以得到至少一物質 S_i ($i = 1, \dots, n$) 之濃度 $[S_i]$ 。

2. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中該關係係為：

$$C_{S_i^+} = [S_i] \times t \times \Delta \times K_{R-S_i} / \zeta \times \gamma^t$$

其中於該兩試驗中改變之參數係為離子 S_i^+ ($i = 1, \dots, n$) 於離子移動率譜術儀器之反應區中的滯留時間，該方法係包括下列步驟：

- 進行該第一試驗，以自所得術譜推導於該第一試驗條件下之 $C_{1S_i^+}$ 、 t_1 、 Δ_1 及 ξ_1 項的值；



(2)

— 進行該第二試驗，以自所得術譜推導於該第二試驗條件下之 C_{2Si^+} 、 t_2 、 Δ_2 及 ξ_2 項的值；

— 採用該等值以得到下列兩方程式：

$$C_{1Si^+} = [Si] \times t_1 \times \Delta_1 \times K_{R-Si} / \zeta_1 \times \gamma^{t_1}$$

及

$$C_{2Si^+} = [Si] \times t_2 \times \Delta_2 \times K_{R-Si} / \zeta_2 \times \gamma^{t_2} ;$$

— 將該等方程式中之第一個除以第二個，以得到此方程式：

$$C_{1Si^+} / C_{2Si^+} = (t_1 \times \Delta_1 \times \zeta_2) / (t_2 \times \Delta_2 \times \zeta_1) \times \gamma^{(t_1 - t_2)}$$

— 自後一方程式得到 γ 值；及

— 所得之 γ 值使用於下式中：

$$C_{1Si^+} = [Si] \times t_1 \times \Delta_1 \times K_{R-Si} / \zeta_1 \times \gamma^{t_1}$$

以得到至少一物質 S_i ($i = 1, \dots, n$) 之值 $[S_i]$ 。

3. 如申請專利範圍第 2 項之方法，其中 t 係藉由改變儀器反應區中的電場 E_{RZ} 而變化。

4. 如申請專利範圍第 2 項之方法，其中 t 係藉由改變試樣氣體流速 F_C 與逆流氣體流速 F_D 之間的比例而改變。

5. 如申請專利範圍第 2 項之方法，其中 t 係藉著於一 IMS 儀器中配置位在沿著離子移動率譜術儀器軸之不同位置上的兩柵條，改變反應區之長度，且於該兩試驗中之各試驗中選擇性地啓動該兩柵條中之一而改變。

6. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中該關係係為：

(3)

$$\frac{96}{3} \quad 15$$

$$C_{S_i^+} = [S_i] \times t \times \Delta \times K_{R-S_i} / \zeta \times \gamma^t$$

其中該兩試驗中改變之參數係為至少一離子 S_i^+ ($i = 1, \dots, n$) 之濃度 $[S_i]$ ，該變化係藉由於試樣氣體中添加已知濃度 x 之物質 S_i 而達到，該方法係包括下列步驟：

— 進行該第一試驗，以自所得之術譜推導於該第一試驗條件下之 $C_{1S_i^+}$ 、 Δ_1 及 ζ_1 項的值；

— 進行該第二試驗，以自所得術譜推導於第二試驗條件下之 $C_{2S_i^+}$ 、 Δ_2 及 ζ_2 項的值；

— 採用該等值以得到下列兩方程式：

$$C_{1S_i^+} = [S_i] \times t \times \Delta_1 \times K_{R-S_i} / \zeta_1 \times \gamma^t$$

及

$$C_{2S_i^+} = ([S_i] + x) \times t \times \Delta_2 \times K_{R-S_i} / \zeta_2 \times \gamma^t;$$

— 將該等方程式中之第一個除以第二個，以得到此方程式：

$$C_{1S_i^+} / C_{2S_i^+} = [S_i] / ([S_i] + x) \times (\Delta_1 \times \zeta_2) / (\Delta_2 \times \zeta_1)$$

；及

— 自後一方程式得到至少一物質 S_i ($i = 1, \dots, n$) 之值 $[S_i]$ 。

7. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中該關係係為：

$$C_{A,S_i^+} = C_{S_i} \times \lambda^t$$

其中該兩試驗中變化之參數係為離子於離子移動率譜術儀器標移區中之滯留時間，該變化係藉著改變儀器漂移區中電場 E_{Dz} 而達到，該方法係包括下列步驟：

(4)

96 3 15

— 進行該第一試驗，以自所得之術譜推導於該第一試驗條件下之 C_{1A,S_i^+} 及 t_1 項的值；

— 進行該第二試驗，以自所得術譜推導於該第二試驗條件下之 C_{2A,S_i^+} 及 t_2 項的值；

— 採用該等值以得到下列兩方程式：

$$C_{1A,S_i^+} = C_{S_i} \times \lambda^{t_1}$$

及

$$C_{2A,S_i^+} = C_{S_i} \times \lambda^{t_2}$$

— 將該等方程式中之第一個除以第二個，以得到此方程式：

$$C_{1A,S_i^+} / C_{2A,S_i^+} = \lambda^{(t_1-t_2)}$$

— 自後一方程式得到 λ 值；

— 所得之 λ 值使用於下式中：

$$C_{1A,S_i^+} = C_{S_i^+} \times \lambda^{t_1}$$

以得到 $C_{S_i^+}$ 之值；及

— 將所得之 $C_{S_i^+}$ 值導入下式中：

$$C_{S_i^+} = [S_i] \times t \times \Delta \times K_{R-S_i} / \zeta \times \gamma^t$$

以得到至少一物質 S_i ($i = 1, \dots, n$) 之值 $[S_i]$ 。

8. 如申請專利範圍第 2、6 或 7 項之方法，其中該 $C_{1S_i^+}$ ， $C_{2S_i^+}$ ， C_{1A,S_i^+} ， C_{2A,S_i^+} ， t_1 ， t_2 ， Δ_1 ， Δ_2 ， ζ_1 和 ζ_2 等項之值係由來自該等試驗之術譜自動地藉具有微處理器之可程式化控制單元得到。

9. 如申請專利範圍第 8 項之方法，其中該單元係使用該等值，以直接提供物質 S_i 濃度值。

修正替換頁
96年3月11日

(5)

10. 如申請專利範圍第 8 項之方法，其中該單元係配置有用以與該離子移動率譜術儀器連接之界面的電腦。

11. 如申請專利範圍第 9 項之方法，其中該單元係為配置有用以與離子移動率譜術儀器連接之界面的電腦。