

[19] 中华人民共和国国家知识产权局

[51] Int. Cl.
H01J 49/00 (2006.01)



[12] 发明专利申请公布说明书

[21] 申请号 200680013893.7

[43] 公开日 2008年12月3日

[11] 公开号 CN 101317246A

[22] 申请日 2006.4.25

[21] 申请号 200680013893.7

[30] 优先权

[32] 2005.4.25 [33] US [31] 60/675,340

[86] 国际申请 PCT/US2006/015948 2006.4.25

[87] 国际公布 WO2006/116564 英 2006.11.2

[85] 进入国家阶段日期 2007.10.25

[71] 申请人 格里芬分析技术有限责任公司

地址 美国印第安纳

[72] 发明人 B·拉迪恩 J·M·威尔斯

G·E·帕特森

[74] 专利代理机构 中国国际贸易促进委员会专利
商标事务所
代理人 赵科

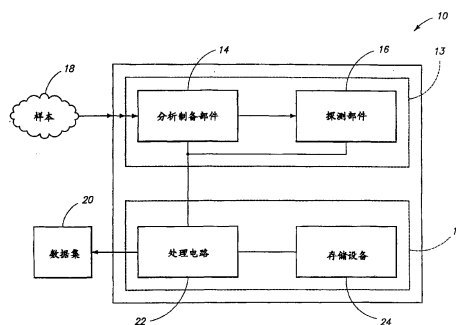
权利要求书4页 说明书19页 附图15页

[54] 发明名称

分析仪器、装置和方法

[57] 摘要

一种样本分析装置(10)包括处理回路(22), 其被耦接到数据集设备(20)和存储设备(24), 以根据一个分析参数设置从分析部件(14)获取一个数据集, 并利用先前获得的另一数据集来准备另一分析参数设置。



1、一种样本分析装置，包括处理回路，被配置为从根据一个分析参数设置配置的分析部件获取一个数据集，并利用先前获取的另一数据集制备另一分析参数设置。

2、如权利要求1的装置，其中处理回路被配置成同时获取所述一个数据集和制备所述另一分析参数设置。

3、如权利要求1的装置，其中处理回路与分析部件连接。

4、如权利要求3的装置，其中分析部件包含质谱仪部件。

5、如权利要求4的装置，其中质谱仪部件包括离子源部件、离子传送门部件、质量分析仪部件和探测部件中一个或多个。

6、如权利要求5的装置，其中质谱仪部件包括第一和第二离子传送门部件和第一和第二质量分析仪部件。

7、如权利要求5的装置，其中质量分析仪部件包括圆柱离子阱。

8、如权利要求5的装置，其中所述离子源部件、离子传送门部件和质量分析仪部件中的一个或多个可被配置成根据所述一个分析参数设置为探测部件提供分析物离子，并根据所述另一分析参数设置对其重新配置。

9、如权利要求8的装置，其中参数设置包括离子门位置参数、俘获RF幅度参数、聚焦DC幅度参数和探测器功率参数中一个或多个。

10、如权利要求1的装置，其中处理回路进一步被配置成利用被用于获取数据集的分析参数设置对数据集进行定标。

11、如权利要求10的装置，其中分析参数设置包括门控参数，并且利用所述门控参数对数据集进行定标。

12、如权利要求1的装置，其中通过获取所述另一数据集的数据集参数并将所述数据集参数与阈值量进行比较来制备所述另一分析参数设置。

13、如权利要求12的装置，其中数据集参数是数据集的总分析物离子丰度。

14、如权利要求12的装置，其中阈值量是上限量。

15、如权利要求14的装置，其中所述比较进一步包括确定超过上限量并存储该超过。

16、如权利要求15的装置，其中通过比较所存储的超过与超过最大值来进

一步制备所述另一分析参数设置。

17、如权利要求 15 的装置，其中数据集参数是数据集的总离子流，并且通过判断所述超过大于上极限并减小所述一个分析参数设置的离子化时间参数以形成所述另一分析参数设置来制备所述另一分析参数设置。

18、如权利要求 12 的装置，其中阈值量是下限量。

19、如权利要求 18 的装置，其中所述比较进一步包括确定下限量的不足并存储该不足。

20、如权利要求 19 的装置，其中通过比较所存储的不足与不足最大值来进一步制备所述另一分析参数设置。

21、如权利要求 19 的装置，其中所述数据集参数是数据集的总离子流，并且通过判断所述不足大于下极限并增大所述一个分析参数集的离子化时间参数而形成所述另一分析参数集来制备所述另一分析参数设置。

22、一种样本分析方法，包括：

从根据第一分析部件参数设置配置的分析部件获取第一和第二数据集，其中所述第一分析部件参数设置从连接到分析部件的处理和控制部件提供给分析部件；和

利用处理和控制部件处理第一数据集从而制备第二分析部件参数设置。

23、如权利要求 22 的方法，其中在获取第二数据集期间执行第一数据集的处理。

24、权利要求 22 的方法，进一步包括根据第二分析部件设置配置分析部件。

25、权利要求 23 的方法，进一步包括：

从根据第二分析部件设置配置的分析部件获取第三数据集；和

利用处理和控制部件处理第二数据集以制备第三分析部件参数设置。

26、权利要求 25 的方法，其中在获取第三数据集期间执行第二数据集的处理。

27、如权利要求 22 的方法，其中所述分析部件被配置成质谱仪，并且所述数据集包括分析物离子丰度。

28、如权利要求 27 的方法，其中所述处理包括将分析物离子丰度与处理和控制部件的存储设备中的预定阈值分析物离子丰度进行比较，并确定数据集的分析物离子丰度与存储设备的阈值丰度之间的差异。

29、如权利要求 28 的方法，其中利用所述差异制备第二分析部件参数设置。

30、如权利要求 29 的方法，其中所述阈值丰度是上限阈值，所述差异大于该上限阈值，并且第二分析部件参数设置包括比第一分析部件参数设置的离子化时间参数小的离子化时间参数。

31、如权利要求 29 的方法，其中所述阈值丰度是下限阈值，所述差异小于该下限阈值，并且第二分析部件参数设置包括比第一分析部件参数设置的离子化时间参数大的离子化时间参数。

32、一种样本分析仪器，包括连接到分析部件的处理和控制部件，所述处理和控制部件包括连接到存储设备的处理回路，所述存储设备包括与数据参数值相关的分析部件参数设置，各个分析部件参数设置分别与各个数据参数值相关，所述处理回路被配置成处理数据集并利用数据集的数据参数从存储设备中选择分析部件参数设置。

33、如权利要求 32 的仪器，其中第一分析部件参数设置与第一数据参数值相关，而第二分析部件参数设置与第二数据参数值相关，所述分析部件根据由处理和控制部件选择性指定的第一和第二分析参数设置进行配置，第一和第二分析设置彼此不同。

34、如权利要求 33 的仪器，其中所述处理和控制部件被配置成利用根据第一分析部件参数设置配置的分析部件来获取第一数据集，并且将所获取的第一数据集的数据参数与定义的阈值量进行比较以选择性地为分析部件指定第一或第二分析参数设置。

35、如权利要求 34 的仪器，其中所述分析部件包括质谱仪部件，并且所述数据集包括分析物离子丰度。

36、如权利要求 35 的仪器，其中所获取的数据参数是总分析物离子丰度。

37、如权利要求 34 的仪器，其中所述定义的阈值量是最小阈值量，处理和控制部件进一步被配置成如果所获取的数据参数大于最小阈值量，则选择性地指定第一分析部件参数设置。

38、如权利要求 34 的仪器，其中所述定义的阈值量是最小阈值量，处理和控制部件被进一步配置成如果所获取的数据参数小于最小阈值量，则选择性地指定第二分析部件参数设置。

39、如权利要求 33 的仪器，其中第一分析部件参数设置与利用根据第一分

析部件参数设置配置的分析部件所获取的数据参数的第一阈值量相关，并且第二分析部件参数设置与利用根据第二分析部件参数设置配置的分析部件所获取的数据参数的第二阈值量相关。

40、如权利要求 39 的仪器，其中处理和控制部件被配置成在根据第二分析部件参数配置分析部件之前首先根据第一分析部件参数配置分析部件。

分析仪器、装置和方法

要求优先权

本申请要求 2005 年 4 月 25 日提交的、题目为“Analytical Instrumentation and Analytical Processes”的美国临时专利申请 No. 60/675,340 的优先权，该专利申请文件全部作为参考合并于此。

技术领域

本公开设计分析仪器、装置和方法。更具体的实施例包括质谱分析仪器、装置和方法。

背景技术

目前，分析仪器通常包括分析制备部件和连接到处理和控制部件的探测部件。该处理和控制部件通常采取被配置成通过给分析制备部件和/或探测部件提供参数而对分析进行控制的计算机的形式。例如，在质谱分析仪器的情况下，处理和控制部件可给探测部件提供探测参数，诸如给电子倍增器的电压和/或电子倍增器接合到接通或关闭级。同样地，处理和控制部件也可以提供离子化能量、离子化时间、扫描范围和/或波形形式的分析制备部件参数。通常，由处理和控制部件将这些参数下载到这些部件，并且利用这些参数来获得数据集。在解释所获得的数据集后，仪器的操作者可能感觉到需要重新定义某些参数、下载这些参数并获得额外的数据集。

本发明提供了分析仪器和分析处理，它们在某些实施例中在分析期间提供对分析部件参数的动态修正。

发明内容

公开了样本分析装置，其可以包括被配置成从根据一个分析参数设置配置的分析部件中获取一个数据集，并利用另一先前获得的数据集制备另一分析参数设置的处理回路。

公开了样本分析方法，其可以包括从根据第一分析部件参数设置配置的分析部件中获取第一和第二数据集，该第一分析部件参数设置从连接到分析部件的处理和控制部件提供给分析部件。样本分析方法可以还包括利用处理和控制

部件来处理第一数据集，从而制备第二分析部件参数设置。

公开了样本分析仪器，其可包括连接到分析部件的处理和控制部件，其中处理和控制部件包括连接到存储设备的处理回路。该仪器的存储设备可以还包括与数据参数值相关的分析部件参数设置，其中分析部件参数设置中的单独一个与数据参数值的单独一个相关。仪器的处理回路可被配置成处理数据集并利用该数据集的数据参数来从存储设备中选择分析部件参数设置。

附图说明

以下参考下面的附图来描述本公开的实施例。

图 1 是根据一个实施例的分析仪器。

图 2 是根据本公开一个方面的质谱分析仪器的一个实施例。

图 3 是根据本公开一个方面的质谱分析仪器的一个实施例。

图 4 描绘了根据本公开的方面配置的质谱分析仪器。

图 5 描绘了根据本公开的方面配置的质谱分析仪器。

图 6 描绘了根据本公开配置的分析部件参数设置。

图 7 是根据本公开的仪器的方块图。

图 8 是根据一个实施例的过程。

图 9 是根据一个实施例的过程。

图 10 是根据一个实施例的过程的一部分。

图 11 是根据一个实施例的图 10 的过程的另一部分。

图 12 是根据一个实施例的过程。

图 13 是根据一个实施例的处理的一部分。

图 14 是根据一个实施例的图 13 的过程的另一部分。

图 15 描绘了根据本公开配置的分析部件参数设置。

具体实施方式

参考图 1-15 描述分析装置、仪器和方法的实施例。

首先参考图 1，仪器 10 被显示为包括连接到分析部件 13 的处理和控制部件 12。例如，仪器 10 可被配置成接收用于分析的样本 18 并在分析样本 18 后提供数据集 20。

样本 18 可以是任何已知的和/或未知的化学成分。例如，样本 18 可以是包括固态、液态和/或气态的无机和有机物质的任何化学成分。根据本发明的适于

分析的样本 18 的具体例子包括挥发性化合物, 诸如甲苯, 或者具体的示例包括高度复杂基于非挥发性蛋白质的结构 (**highly-complex non-volatile protein based structure**), 诸如缓激肽。在某些方面, 样本 18 可以是含有不止一种物质的混合物, 或者在其他方面中, 样本 18 可以是基本上纯净的物质。

仪器 10 可以是配置成具有处理和控制部件 12 和分析部件 13 的任何仪器。这包括装备有诸如火焰离子化探测器、紫外可见光 (UV-vis) 探测器、传导探测器、红外 (IR) 探测器和/或质谱探测器这样的探测器的用于化学分析, 诸如气相或液相色谱分析的分析装置。仪器 10 可按 2005 年 7 月 13 日提交的、题目为 **Mass Spectrometer Assemblies, Mass Spectrometry Vacuum Chamber Lid Assemblies, and Mass Spectrometer Operational Methods** 的美国专利申请系列号为 10/542,817 中所描述的进行配置, 所述专利申请全部作为参考结合于此。仪器 10 同样可按 2005 年 10 月 20 日提交的、题目为 **Mass Spectrometry Instruments and Methods** 的美国专利申请系列号为 10/554,039 中所描述的进行配置, 所述专利申请全部作为参考结合于此。作为另一示例, 仪器 10 可按 2005 年 6 月 13 日提交的、题目为 **Analytical Instruments, Assemblies, and Methods** 的国际专利申请系列号为 PCT/US05/20783 中所描述的进行配置, 所述专利申请全部作为参考结合于此。仪器 10 可包括连接到处理和控制部件 12 的分析部件 13。

分析部件 13 包括连接到处理和控制部件的探测部件 16。探测部件 16 可包括质谱仪、火焰离子化探测器、热传导探测器、热离子探测器、电子捕获探测器或原子发射探测器。此外, 探测部件 16 可包括吸收探测器, 诸如紫外吸收探测器、荧光探测器、电化学探测器、折射率探测器、传导探测器、傅里叶变换红外光谱计、光散射探测器、光离子化探测器和/或二极管阵列探测器。探测部件 16 可以是原子光谱探测器、发射光谱探测器、或核磁共振光谱探测器。示例性的探测部件包括在美国专利申请系列号为 10/537,019、题目为 **Processes for Designing Mass Separators and Ion Traps, Methods for Producing Mass Separators and Ion Traps, Mass Spectrometers, Ion Traps, and Methods for Analyzing Samples** 中所描述的那些部件, 该专利申请全部作为参考结合于此。附加的探测部件包括在 2004 年 9 月 3 日提交的国际专利系列号为 PCT/US04/29127、标题为 **Ion Detection Methods, Mass Spectrometry Analysis**

Methods, and Mass Spectrometry Instrument Circuitry 中描述的那些部件, 该专利申请全部作为参考结合于此。

如果需要, 分析部件 13 还可包括分析制备部件 14。例如, 分析制备部件 14 可包括色谱、衍生和/或吹扫捕集 (purge and trap) 部件。示例性分析制备部件包括在 2005 年 6 月 30 日提交的、题目为 Spectrometry Instruments, Assemblies and Methods 的美国专利申请系列号为 11/173,263 中所描述的那些, 该专利申请全部作为参考结合于此。分析部件 13 还可按 2005 年 6 月 13 日提交的、题目为 Instrument Assemblies and Analysis Methods 的美国专利申请 No. 11/152,395、以及 2005 年 5 月 13 日提交的、题目为 Analytical Instrumentation and Processes 的美国临时专利申请 No. 60/681,188 中描述的进行配置, 这两个专利申请全部作为参考结合于此。

分析部件 13 可包括可以根据分析参数配置的那些分析部件。根据示例性实施例, 分析部件 13 可根据分析参数设置来配置。例如, 在分析制备部件 14 是气相色谱部件时, 气相色谱部件根据可以包括诸如进样口温度 (injector temperature)、柱箱程序 (oven program) 和/或分流/不分流中继时间 (split/splitless relay time) 这样的参数的分析参数设置进行配置。作为另一示例, 在分析制备部件 14 是液相色谱部件时, 液相色谱部件根据可以包括诸如样本体积和液相组分程序 (liquid phase composition program) 这样的参数的分析参数设置进行构建。

作为另一示例, 分析部件 13 可包括可以根据分析参数设置进行配置的探测部件 16。例如并仅作为示例, 探测部件 16 可以是质谱探测器部件, 其包括连接到离子阱的离子化部件和探测器。质谱探测器部件可根据包括例如离子化时间参数和/或波形参数的质谱分析部件参数设置进行配置。根据示例性实施例, 仪器 10 可按 2006 年 3 月 3 日提交的、题目为 Analysis Device Operational Methods and Analysis Device Programming Methods 的美国专利申请 No. 10/570,706 中描述的进行配置, 该专利申请全部作为参考结合于此。仪器 10 还可按照 2006 年 3 月 3 日提交的、题目为 Mass Spectrometry Methods and Devices 的美国专利申请 No. 10/570,707 中描述的进行配置, 该专利申请全部作为参考结合于此。根据用于分析样本 18 的分析参数设置配置分析部件 13 可影响以数据集 20 的形式获取什么。例如, 在质谱部件的情况下, 离子化时间越长, 所获取的数据集 20 将

表示不期望的效果、诸如空间电荷效应（下面描述）的可能性越高。

处理和控制部件 12 可被用于根据分析参数设置配置分析部件 13，以及获取和/或处理数据集 20。数据集 20 可包括数据参数。例如，利用被配置为连接到二极管阵列探测器的高性能液相色谱分析仪的分析部件所获取的数据集 20 的数据参数可包括总吸光率、在选定波长的总吸光率和/或在选定时间或时间范围内的吸光率。作为另一示例，利用被配置为质谱仪的分析部件所获取的数据集 20 的数据参数可包括总分析物离子丰度和/或特定 m/z 比率下的总丰度。

处理和控制部件 12 可以是能够控制仪器 10 的各种参数的计算机和/或小型计算机。处理和控制部件 12 可包括处理回路 22 和存储设备 24。例如，处理回路 22 被配置成从存储设备 24 中获取分析部件参数，以及获取从探测部件 16 接收的处理数据集 20。回路 22 还被配置成处理从探测部件 16 所接收的数据集 20，并动态地修改分析部件 13 的参数。分析部件 13 的参数的动态修改例如可在仪器 10 正分析样本 18 期间和/或在利用仪器 10 对样本 18 进行分析之间发生。

处理回路 22 可被实现为被配置成执行例如包括软件和/或固件指令的可执行指令的处理器或其他结构。处理回路 22 可附加地包括硬件逻辑、PGA、FPGA、ASIC 和/或其他结构。在示例性实施例中，数据集 20 可经由 FPGA 处理回路 22 从仪器 10 中输出。在另一实施例中，数据集 20 可直接从其中提供适当总线馈入的处理回路 22 的总线输出。处理回路 22 可包括在利用处理回路 22 的模拟处理期间检索、记录和/或转换数据集 20 的模数转换器 (ADC)。处理回路 22 还可在处理数据集 20 之前放大从探测部件 16 接收的模拟信号。

存储设备 24 连接到处理回路 22，并被配置成存储电子数据、诸如可执行的指令的程序（例如，软件和/或固件）、数据或其他可包括处理器可用介质的数字信息。处理器可用介质包括由包括代表性实施例中的处理回路的指令执行系统使用或与其结合使用的可以包含、存储或维持程序数据或数字信息的任何产品。

示例性的处理器可用介质可以包括任何一种物理介质，诸如电子的、磁的、光学的、电磁的、红外的或半导体的介质。处理器可用介质的一些更具体的示例包括但不限于便携式磁性计算机碟片，诸如软盘、zip 盘、硬盘驱动器、随机存取存储器、只读存储器、闪存、高速缓冲存储器和/或其他能够存储程序、数据或其他数字信息的构造。

包括与存储设备 24 结合的处理回路 22 的处理和控制部件 12 可以被用于通过在用于产生数据集 20 的分析部件参数的环境中处理数据集 20 而动态地修改分析部件 13 的参数。例如，数据集 20 可包括数据集的参数，例如在质谱仪器数据集的情况下的总分析物离子丰度。可以在用于产生数据集参数、诸如离子源部件的离子化时间参数的分析部件参数的环境下处理总丰度。在用于产生数据集 20 的分析部件参数的环境下处理数据集 20 之后，部件参数可被修改，分析部件 13 可以修改后的参数被重新配置，并且随后利用重新配置的仪器 10 执行样本 18 的分析。可以如仪器 10 的用户所期望的那样连续地或间隔地利用该动态分析。

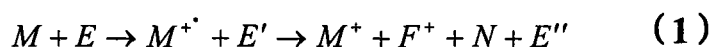
根据本发明的数据的获取和产生可用处理和控制部件 12 来推动。处理和控制部件 12 可以是能够控制仪器 10 的各种元件的计算机或小型计算机。该控制包括这里所述的 RF 和 DC 电压的特定施加，并可进一步包括确定、存储和最终显示质谱。处理和控制部件 12 可包含数据获取和搜索软件。在一个方面，这样的数据获取和搜索软件可被配置成执行包括上述总分析物计数的编程获取的数据获取和搜索。在另一方面，数据获取和搜索参数可包括用于校正产生到用于获取数据的预定程序的分析物的量的方法。

根据参考图 2 的示例性实施例，其中显示了仪器 10 的方块图，其被配置成包括都与处理和控制部件 12 连接的进样系统部件 26、离子源部件 28、离子传送门部件 30 和质量分析仪部件 32 的质谱仪。如图 2 所描绘的，样本 18 可被引入进样系统部件 26 中。现在将参考本公开的多个方面来描述样本 18 的分析，以提供其他示例性实施例。

进样系统部件 26 可被配置成将一定量的样本 18 引入到仪器 10 中。进样系统部件 26 可被配置成制备用于离子化的样本 18。进样系统部件的类型可包括分批进样、直接进样、色谱进样 (chromatographic inlet) 和浸透膜或毛细管膜进样。进样系统部件 26 可被配置成制备用于在气相、液相和/或固相中进行分析的样本 18。在一些方面，进样系统部件 26 可与离子源部件 28 结合。

离子源部件 28 可被配置成接收样本 18 并将样本 18 的组分转换成分析物离子。这种转换可以包括用电子、离子、分子和/或光子对样本 18 的组分轰击。这种转换也可通过热能或电能来执行。在一方面，离子源部件 28 可提供预定量的能量给样本 18。为样本 18 提供该预定能量数量就提供了包含至少一个离子化分

子和/或多个离子化分子的样本，并且还可提供其他分子和离子的形成，如下面公式 1 所示：



其中 M 代表中性分析物分子，E 代表提供给 M 的能量； M^+ 代表内部激发的离子； E' 代表没有作为内能或动能而沉积到 M^+ 中的任何 E， M^+ 、 F^+ 和 N 分别代表带电的分析物离子、带电的离解产物和中性离解产物；而 E'' 代表没有作为内能或动能留在 M^+ 、 F^+ 或 N 中的任何 E。例如，可变能量离子源部件 28 可将样本的离解量碰撞成这些其他分子 (F^+ 和 N)。

离子源 28 可利用电子离子化 (EI, 通常适于气相离子化)、光子离子化 (PI)、化学离子化、碰撞活化离解和/或电喷射离子化 (ESI)。例如在 PI 中，可改变光子能以改变样本的内能。而且，当利用 ESI 时，样本可在大气压下被激发，并且可以改变在将离子从大气压下传送到质谱仪的真空中时所应用的电势以引起离解的不同程度 (常常被称为“喷嘴 (nozzle)/撇油器 (skimmer)”或“进样锥电压 (cone voltage)”离解)。参考图 3，在图 2 中是 28 的示例性离子源可包括真空区域 34、EI 灯丝 36 和 EI 灯丝电源 38。

再次参考图 2，根据本公开的一个方面，分析物离子可行进到传送门部件 30。离子传送门部件 30 可被配置成门控 (gate) 由离子源部件 28 所产生的分析物束。再次参考图 3，在图 2 中是 30 的示例性离子传送门可包括离子传送透镜 40 和传送透镜电源 42。根据本公开的示例性实施例，离子传送门部件 30 可被配置成允许由离子源部件 28 所产生的分析物束连续，或离子传送门部件 30 可被配置成偏转分析物束。这可被称为“门控”分析物束。当“门”开启时，分析物束可通到质量分析仪部件 32；当门关闭时，束被偏转。

图 4 显示了“门控”的一个示例性描述。参考图 4a，离子源部件 28 产生穿过到达离子传送门部件 30 的分析物束。当在图 4a 中配置仪器 10 时，由离子源部件 28 所产生的束被偏转，门关闭。参考图 4b，离子源部件 28 产生分析物束，并且束继续到质量分析仪部件 32。如图 4b 中所配置的，门开启。开启和关闭离子传送门 30 的示例性方法包括为离子传送门部件 30 提供 DC 电压以关闭该门，和去除 DC 电压以开启该门。给离子传送门提供 DC 电压是可被用于利用处理和控制部件 12 配置分析部件 13 的一个示例性分析部件参数。在门开启的情况下，分析物束可被传递到质量分析仪部件 32，并受到本领域已知的进一步

操纵，例如质量分析和/或串联质谱以获取数据集 20 用于由处理和控制部件 12 处理。

质量分析仪部件 32 可包括磁性部分、静电部分和/或四极滤波器部分。更具体的，质量分析仪部件 32 可包括一个或多个三级四极、四极离子阱、圆柱离子阱、线性离子阱、直线离子阱、离子回旋共振和四极离子阱/飞行时间质谱仪。四极离子阱或“保罗 (Paul) 阱”可指具有环形电极和两个端帽的离子阱。环形电极在一个截面上可具有双曲线形状。这两个端帽也可以在一个截面上具有双曲线形状。圆柱离子阱 (CIT) 已经被认为是对四极离子阱的变异，其中环形电极和端帽可以在一个截面上具有平坦的表面。线性离子阱可由多组平行杆组成，这些杆在一个截面上是圆形的、双曲线的和/或平的。参考图 3，一个示例性质量分析仪部件 32 可包括分析仪真空区域 44、圆柱离子阱 46 和 RF/DC 电压供应 48。

接着参考图 5，显示了仪器 10 的两个示例性配置。如图 5a 中所描绘的，用于离子传送门部件 30 的 DC 电压被接通，并且用于质量分析仪部件 32 的 RF 俘获电压 (RF trapping voltage) 被切断，同时质量分析仪部件 32 的 DC 电势被接通。这种配置允许由离子源部件 28 所产生的分析物束穿过离子传送门部件 30 和质量分析仪部件 32 到达探测部件 16。RF 俘获电压的配置是可被处理和控制部件 12 用于配置分析部件 13 以获取数据集 20 的另一个分析部件参数示例。示例性的探测部件可包括一个或多个电子倍增器、法拉第杯收集器和照相探测器。探测部件 16 可产生与离子源部件 28 随着时间的流逝而产生的分析物总数成比例的信号。随着时间的流逝而产生的分析物离子的总数可以被称为总分析物离子计数和/或总分析物离子丰度。根据本公开，总分析物离子计数可被用于控制进入质量分析仪部件 32 的离子量。如前面所述，总分析物丰度是处理和控制部件 12 可从分析部件 13 获取的数据集 20 的示例性参数。

如图 5b 所示，离子源部件 28 所产生的分析物离子的一部分可被质量分析仪 32 基于总分析物丰度进行采样。例如，并且仅作为示例，处理和控制部件 12 可被配置以期望数量的要由质量分析仪部件 32 分析的分析物离子。处理和控制部件 12 于是可以配置仪器 10 以便通过将离子传送门部件 30 配置为以期望的间隔开启和关闭来仅允许该数量的分析物离子进入质量分析仪部件 32。例如，传送门部件 30 以这些间隔开启和关闭是由处理和控制部件 12 规定的分析部件参

数。仪器 10 可根据示例性的分析部件参数设置被配置为通过开启离子传送门部件 30 并将 RF 电压施加到质量分析仪部件 32 而不施加 DC 电势来采样。这一配置可基于先前和/或在预定时间确定的总分析物离子丰度被保持一规定时间。可以理解的是，总分析物离子丰度可根据样本 18 的特征、离子源部件 28 的配置、质量分析仪部件 32 的配置和正执行的实验而改变。处理利用配备以上述分析参数设置的分析部件 30 所获取的数据集 20，质量分析仪部件可被填充一预定的时间，并且可以在质量分析仪部件内的总体 (population) 上执行本领域已知的质量分析仪的操纵。

参考图 6，仪图画的形式显示了仪器 10 的部件的控制，以阐述利用根据分析部件参数设置配置的分析部件 13 的示例性分析部件参数设置。如在分析部件参数设置 1 中所示，离子传送门部件 30 是开启的，质量分析仪部件 32 的 RF 俘获幅度 (RF trapping amplitude) 是关断 (off) 的，质量分析仪部件 32 的 DC 电压是接通 (on) 的，同时探测部件 16 是接通的。根据该分析部件参数设置配置允许分析物束从离子源部件 28 传递到探测部件 16，并如图 5a 中所示地被测量。在分析部件参数设置 2 期间，离子传送门部件 30 关闭，质量分析仪部件 32 的聚焦 DC 电压关断，并且探测部件 16 被切断。总分析物离子丰度可以从分析部件参数设置 1 的开始到分析部件参数设置 2 的开始所确定的数据集 20 的参数。该丰度可被用于确定剩余阶段的时间长度。例如，总离子丰度可由处理和探测部件 12 处理，以产生然后可被用于配置分析部件 13 并获取附加的数据集 20 的附加的分析部件参数设置。

根据示例性实施例，在分析部件参数设置 3 期间，质量分析仪部件 32 的俘获 (trapping) RF 被接通，聚焦 DC 幅度被切断，离子传送门部件 30 开启。质量分析仪部件 32 被填充一预定的时间或根据总分析物离子丰度计算的时间。如图 6 所示，在分析部件参数设置 4 期间，分析部件 13 可被配置以可选的分析物冷却期 (analyte cooling period)。在分析部件参数设置 5 期间，分析部件 13 可被配置成经由施加俘获 RF 幅度斜坡来提供波形，其中探测器 16 被接通。对于本领域已知的其他离子操纵的设置 4 和 5 之间的附加期当然是可能的，并且在设置 5 期间所用的质量分析方法可包括具有施加的辅助电压或非破坏性离子探测的俘获 RF 斜坡。

根据示例性实施方式，质量分析仪部件 32、诸如线性离子阱可具有在分析、

诸如利用根据设置 1 的分析部件参数配置的分析部件 13 分析期间施加到平行杆电极的 RF 电压。这可给探测器提供分析物束的聚焦。该聚焦 RF 可以是与被用于存储用于操纵的离子的俘获 RF 不同的幅度和/或频率，如图 6 中设置 3-5 中所述。

参考图 7，显示了质谱仪器 70。仪器 70 例如可包括连接到离子源部件 28 的离子门/质量分析仪配置 72。如图 7 所示，可如上所述地利用次级离子门部件 74 和质量分析仪部件 76 来单独地确定由离子源部件 28 所产生的总分析物离子丰度。然后，总分析物计数可被用于配置离子门部件 30、质量分析仪部件 32 和探测部件 16 以用于如上所述的采样。

参考图 8，在一个示例性实施例中，例如可以通过选择多个数据集参数中的一个或多个并随后在被用于获取数据集 32 的情况下处理所选的数据集参数来选择性地指示分析部件参数设置。根据示例性实施例，处理和控制部件 12 可被配置成利用根据由处理和控制部件 12 选择性指示的第一和第二分析参数设置配置的分析部件 13 来获取数据集 20 形式的样本特征。根据示例性实施方式，第一和第二分析设置可彼此不同。图 8 是利用处理回路 22（图 1）来执行该选择的处理步骤的示例。其他方法可能包括更多、更少或可替换的步骤。

在 S20 中，利用被配置以分析部件参数设置 #1 的仪器获取数据集 #1。根据示例性实施例，分析部件 13 可根据由处理和控制部件 12 所指示的第一分析部件参数设置被配置。例如，分析部件参数设置 #1 可被用于配置分析部件 13（图 1）并获取数据集 20（图 1）。与质谱主旨一致但不限于此，分析部件参数设置 #1 可以是质谱分析部件的参数设置。例如并仅作为示例，分析部件参数设置 #1 可限定用于质谱分析的预定质量范围、和/或如上所述的门控配置。

数据集 #1 可包括利用以分析部件参数设置 #1 配置的仪器所获取的数据。与上述质谱主旨一致地，数据集 #1 可以是利用质谱仪器所获取的数据集。例如并仅作为示例，数据集可包括诸如总离子流、探测的选择性离子、所选的探测质量范围和/或探测的质谱这样的数据集参数。

然后，处理行进到 S22，其中在 S20 中所获取的数据集被预定的数据集参数和/或多个预定的数据集参数分类，以隔离预定的数据参数，诸如总分析物离子丰度。

处理然后行进到 S24，其中判断在 S22 中分类的所获取的数据参数是否大

于预定的最小值。根据示例性实施例，例如，预定的最小值可与存储设备 24 中的第一分析部件参数设置相关。所获取的第一数据集的数据参数可与限定的阈值量进行比较，以选择性地规定分析部件的第一或第二分析参数设置。例如，如果某离子的总量是所获取的数据参数，则将判断该离子量是否大于预定的最小离子量。如果所获取的数据参数大于预定的最小值，则处理行进到 S26，并且以由分析部件参数设置 #1 配置的仪器 10 开始分析（图 1）。

如果所获取的数据参数小于最小值，则处理行进到 S28，其中利用分析部件参数设置 #2、第二分析部件参数设置获取数据集 #2。在一个示例性实施例中，并且与质谱主旨一致，分析部件参数设置 #2 可包括与利用上面的分析部件参数设置 #1 所限定的质谱范围不同的质谱范围，或者例如参数设置 #2 可包括更长的开启门时间，以有利于质量分析仪 32 获取更多的分析物离子（图 2）。

处理行进到 S30，其中通过一个或多个等同于上面用于对数据集 #1 进行分类的预定数据集参数的预定数据集参数对所获取的数据集 #2 进行分类。例如，数据集可通过诸如离子丰度和/或 TIC 这样的数据集参数被分类。

处理行进到 S32，判断在 S30 中分类的所获取的数据参数是否大于预定的最小值。该预定的最小值例如可与存储设备 24 中的第二分析部件参数设置相关。例如，如上所述，利用被配置以分析部件参数设置 #2 的仪器所获取的离子丰度和/或 TIC 是否大于预定的离子丰度或 TIC 最小值。如果所获取的数据参数大于最小值，则处理行进到 S34，其规定分析应该以分析部件参数设置 #2 开始。如果预定的数据参数小于最小值，则处理可以返回到 S20。

仅仅作为利用图 8 所述处理的一个示例，仪器、诸如仪器 10（图 1）可被配置以多个分析部件参数设置配置，并且该仪器可能能够在获取数据期间循环通过这些分析部件参数设置的至少两个。在示例性实施例中，该处理可被用于连续监视。同样地，所获取的数据参数可指示样本 18（图 1），其具有利用被配置以已经被用于第一次探测特征的分析部件参数设置的仪器被最佳分析的特征。

例如，利用这一处理并与质谱主旨一致但不限于此，仪器 10（图 1）可被配置用于环境监控。在这种配置中，仪器 10（图 1）可被配置成在预定场所连续进行空气采样。例如，该场所可能包含已知的诸如乙醇和/或 BTEX（苯、甲苯、乙苯、二甲苯）这样的化合物，但是不知道这些化合物在该场所内是否出

现在相同位置或不同位置。仪器可以被配置以被设计用于获取可包括乙醇特征数据集参数（例如， m/z 31， m/z 45，和 m/z 46）的数据参数设置的乙醇分析组分参数设置。例如，参考图 8 的处理的 S22，如果乙醇的数据集参数特征大于预定的最小值，则在 S26 中，分析开始于乙醇分析组分参数设置。

例如，参考图 8 的 S28，仪器可被配置以可被设计用于获取可包括 BTEX 特征数据集参数（例如， m/z 78， m/z 91 和/或 m/z 105）的数据集的 BTEX 分析组分参数设置。如果这些数据集参数比预定的最小值大，则在 S28 中，分析可开始于 BTEX 分析组分参数设置。这样，仪器 10（图 1）可通过动态地修改其分析部件的参数来执行示例性的动态分析。

根据一个示例性实施例并参考图 9，描述了用于动态修改仪器分析部件参数的处理。这种处理例如可在利用诸如参考图 1 所描述的分析仪器获取数据集期间并行地、相继地和/或间隔地执行。在示例性实施例中，可以在数据获取期间和/或在数据获取完成后按仪器操作者的规定由处理和控制部件 12 制备修正后的仪器参数。例如，样本分析装置可包括处理回路，其被配置为从根据至少一个分析参数设置配置的分析部件获取一个数据集，并利用先前获取的另一数据集制备另一分析参数设置。根据其他示例性实施例，处理回路可被配置成同时获取这一个数据集并制备其他分析参数设置。

分析方法可包括从根据由连接到分析部件的处理和控制部件提供给分析部件的第一分析部件参数设置配置的分析部件获取第一和第二数据集。方法还包括处理第一数据集以利用处理和控制部件制备第二分析部件参数设置。

根据示例性实施例，可以在获取第二数据集期间执行对第一数据集的处理。分析部件也可根据第二分析部件设置被配置。方法还包括从根据第二分析部件设置配置的分析部件中获取第三数据集，并处理第二数据集以利用处理和控制部件来制备第三分析部件参数设置。例如，可以在获取第三数据集期间执行第二数据集的处理。

例如并首先参考 S40，可以利用以分析部件参数设置 #1 配置的分析仪器获取数据集 #1。根据示例性实施例，分析部件 13 可被配置成包括离子源部件、传送门部件和质量分析仪部件。例如，这些部件可根据一个分析部件参数设置被配置成将分析物离子提供给探测部件，并根据另一分析部件参数设置被重新配置。分析部件参数设置可包括一个或多个离子门位置参数、俘获 RF 幅度参

数、聚焦 DC 幅度参数和以前详细描述的检测器能量参数。利用上面图 8 中所述的¹处理可预定和/或规定参数设置 #1。

处理行进到 S42，其中利用分析部件参数设置 #2 获取数据集 #2，并同时例如通过利用¹处理和¹控制部件 12 处理数据集 #1 而制备分析部件参数设置 #3。处理行进到 S44，其中利用在 S42 中制备的分析部件参数设置 #3 获取数据集 #3 并基于在 S42 中所获取的数据集 #2 制备分析部件参数设置 #4。处理可如 S46 中继续那样在该获取和参数制备模式中继续，其中利用分析部件参数设置 N 获取数据集 N，并且根据数据集 N-X 制备分析部件参数设置 N+1，其中 X 为 2、3、4。

处理随后可行进到 S48，其中在一个示例性实施例中但并非必须地，在处理期间所获取的数据集和/或各个数据集参数可以与所制备的分析部件参数设置定标地一致。根据示例性实施例，处理和¹控制部件 12 的处理回路 22 可被进一步配置成利用被用于获取数据集的分析参数设置对数据集进行定标。例如，分析参数设置可包括门控参数，并且利用门控参数、诸如门开启的时间长度对数据集进行定标。

参考图 9 的 S42、S44 和 S46，分析部件参数设置可基于先前获取的数据集进行制备。参考图 10，描绘了用于基于数据集制备分析部件参数设置的一个示例性处理。该处理可开始于 S50，其中可以获取数据集的数据集参数。该处理可以但并非必须地包括 S52，其为在 S50 中所获取的数据集参数提供数字滤波器应用。

该处理然后继续到 S54，其中判断数据集参数是否超过预定上限。例如，通过获取另一数据集的数据集参数并将其他数据集参数与阈值量进行比较来制备另一分析参数设置。根据示例性实施例，数据集参数是数据集的总分析物离子丰度。例如，阈值量可以是丰度的上限量。比较可包括确定超过上限量，并存储该超过。

装置可被配置成阈值量是下限量，并且比较可包括确定下限量的不足并存储该不足。例如，如果数据集参数确实超过上阈值，则在 S56 进行超过量的增量计数，然后处理继续到 S58，在此判断数据集参数是否超过预定下阈值。如果超过下阈值，则进行该下阈值的超过数据集参数的增量计数，然后处理继续到 S62，在此判断数据集参数是否已经超过预定的最大值。根据示例性实施方

式，通过比较所存储的超过与该超过最大值来进一步制备其他分析参数设置。如果已经超过预定的最大值，则该值在 S64 中被标注，处理继续到 S66，并记录向上计数、向下计数与已经超出最大值的次数的判断的总和。

在求和之后，处理可继续到 S68，其中判断是否需要更多数据。如果需要更多数据，则处理回到 S50；如果不需要，则处理可以继续到图 11 中所示的处理，开始于 S70。

根据示例性实施例，装置可被配置成将数据参数的超过计数与和用于获取数据集的分析部件参数相关的数据集参数限制相比较。例如，参考图 11 和 S70，判断增量向上计数是否已经超过数据集参数极限。如果已经超过向上计数，则处理可以继续到 S72，其中可修改用于获取数据集的分析部件参数设置。

当向上计数还没有超过向上计数极限时，处理可继续到 S74，其中判断记录的最大值是否已经超出最大值极限。如果已经超出该极限，则处理可如上所述继续到 S72。如果没有，则处理可继续到 S76，并判断最大值超出次数与向上计数极限的总和是否超出预定的数据集参数极限，并且如果是，则处理如上所述前进到 S72。

从 S72 开始，在分析部件参数设置修改后，在 S78 中判断修改后的分析部件参数设置是否包括比预定的最小值大的预定分析部件参数。如果修改后的参数大于预定的最小值，则处理行进到 S82，其中存储修改后的分析部件参数设置。例如，如果数据集参数是数据集的总分析物离子丰度，并且确定超过大于上限，则被用于获取数据集的分析部件参数设置可被修改以包括减少的离子化时间参数。该修改后的分析部件参数设置随后可如上所述被用于重新配置分析部件 13。

例如，如果修改后的参数小于预定的最小值，则在预定的最小值处设定修改后的参数，并且修改的参数设置被存储在设备 24（图 1）中。在示例性实施例中，可存储修改后的分析部件参数设置，以在样本分析和数据集制备中使用。例如，参考图 9 和 S42，该修改后的分析部件参数设置可包括基于数据集 #1 的参数设置 #3。

根据示例性实施例，可通过将所存储的不足与不足最大值进行比较来制备修改后的分析参数设置。例如，参考图 11 的 S76，如果在 S70 向上计数极限小于总极限，在 S74 中最大值小于极限，并且在 S76 中总数小于极限，则处理行

进到 S84，其中判断数据参数的较低计数是否小于预定的数据参数极限。如果较低计数小于该极限，则处理行进到 S86，其中修改用于获取数据参数的分析部件参数设置。处理从 S86 行进到 S88，其中判断修改后的分析部件参数是否大于预定的参数最大值。如果修改后的分析部件参数大于预定的参数最大值，则处理行进到 S90，其中预定的最大参数被用在修改后的参数设置中，并存储修改后的参数设置。如果在 S88 中修改后的参数小于最大值，则处理行进到 S92，其中存储修改后的参数设置。例如，如果数据集参数是数据集的总分析物离子丰度，则增大用于获取数据集的分析参数设置的离子化时间参数可被用来形成另一分析参数设置，并且这个其他分析参数设置可被用于配置分析部件 13。

参考图 11 中所示处理的 S84，如果较低计数极限小于预定极限，则存储与用于获取数据集相同的分析部件参数设置。当参考图 S94 时，所存储的修改后的分析部件参数设置或未修改的分析部件参数设置例如可结合图 8、9 和/或 12（以下讨论）所示的处理被使用，例如以便在获取数据或“不工作”的同时动态地修改分析仪器、诸如分析仪器 10（图 1）的分析部件参数设置。

参考图 12，一个实施例还提供了用于获取数据集并在获取后继数据之前修改分析部件参数设置的动态分析处理。图 12 的处理可从 S100 开始，其规定利用被配置以分析部件参数设置 #1 的仪器来获取数据集 #1。该处理继续到 S102，其提供基于数据参数设置 #1 制备分析部件参数设置 #2。这个基于数据参数设置 #1 制备分析部件参数设置 #2 可如上面参考图 10 和 11 所述来执行。该处理可继续到 S104，并且可以利用在 S102 中制备的分析部件参数设置 #2 来获取数据集 #2。该处理然后可行进到 S106，其提供基于数据 #N-X 制备分析部件参数设置 #N，其中 X 等于 1、2、3...等。如图所示，当参考 S108 时，可以利用在 S106 中制备的分析部件参数设置 #N 获取数据集 #N。该处理可继续到 S110，其中可以以修改后的分析部件参数设置对所获取的数据集进行定标。

如利用图 9 和 12 中变量 N 所指示的，该处理无需预定的基于数据集的分析部件参数设置制备序列。处理可提供在获取数据集过程中的任意点处分析部件参数设置的制备。本公开预期了一种算法，其预定由该算法定义的处理中各点处基于数据集的分析部件参数设置的制备。

连续并分别参考图 9 和 12 的 S48 和 S110，可对以修改后的分析部件参数设置所获取的数据集。在一个示例性实施例中，该定标可包括在对分析部件参

数进行修改的程度的情况下所获取的数据参数的按比例的增加或减少。例如，并仅作为示例，并且与质谱主旨一致而限于此，离子化时间可以仅是在分析部件参数设置中修改的很多分析部件参数的其中之一。修改后的分析部件参数设置例如可导致包括离子丰度数据参数的数据集。根据离子化时间参数的修改可对离子丰度进行定标。定标可以是利用预定的公式成比例的或缩放的，而不管数据参数在修改后的参数设置的情况下能够被定标。

与质谱主旨一致但并非限于此，参考例如仪器 10 和图 1-6 来回忆上述的门控。在一个示例性实施例中，例如通过随着样本浓度的改变而改变离子传送门参数、诸如离子化时间，可动态地修改初始参数以允许类似数量的分析物离子被提供给质量分析仪部件。

在一个示例性实施例中，例如通过基于先前所获取的数据修改离子化参数并在后继分析期间将这些修改后的参数提供给仪器的部件，可改变对于给定参数设置的离子化时间参数。如上所述，质量分析仪部件可具有提供给它们的参数，这些参数包括诸如在质量分析仪部件、诸如离子阱中操纵分析物离子的电压波形这样的参数。经由在根据此处所述处理的分析期间控制各事件的定时的中继，这些电压波形参数结合其他分析参数、诸如离子化时间参数可以以处理和部件被动态地修改并被指示给分析部件。

例如，仪器可产生 RF 波形参数并将该参数应用到质量分析仪部件。由此，质量分析仪部件可被配置成存储预定质量的分析物离子，从而通过以固定速率执行数字化波形信息来以预定频率提供特定分析物离子到探测部件，以便改变比率和分析分析物离子。速率包括诸如每秒 2 千万个样本 (M 样本/秒) 的速率。在一个示例性实施例中，可以为仪器提供分析参数，其中分析参数包括具有固定离子化持续时间作为质量分析参数的第一事件的离子化时间参数。例如通过将质量分析扫描参数的开始偏移指定成不是扫描的第一数据点的其他形式，可将离子化时间参数设置成从零到质量分析参数中所指定的整期的任意值。

例如，如果扫描参数被下载到质量分析部件、诸如 10 毫秒的离子化参数，这可表示在存储器中所存储的 200000 个数据点来表示在该 10 毫秒时间段期间质量分析部件的 RF 波形。如果为仪器提供 5 毫秒的离子化时间，则仪器可以不是以离子化时间的第一点、而是在质量分析扫描参数中数据点的数量大约 100000 个以后开始记录 (clock out) 从仪器所获取的数据集。在示例性实施例

中，允许提供离子化时间的中继可在该 5 毫秒时间段期间被接通，导致 5 毫秒的离子化时间。通过指定在何处开始记录数据，可将离子化时间设置到所需的任何值，而无需再计算下载到质量分析仪部件的波形参数。

在特定的实施例中，并参考上述图 8、9 和 12，利用以前的分析参数所获取的数据集可被用于确定进入质量分析仪部件的分析物的量并计算新的参数，诸如用于制备修改后参数设置的离子化时间。可被用于确定分析物的量的数据集参数存在于质量分析仪中，并因此用于后继分析的离子化时间可包括质谱峰的高度、质谱峰的宽度和/或质谱峰的总丰度（即总离子流（TIC））或这些或其他因子的任意组合。在示例性实施例中，图 8、9 和 12 中描述的处理不使用可能在分析参数的修改和在后继分析中所使用的修改参数之间引入一个扫描迟滞的预扫描。

在示例性实施例中并参考图 8 如上所述，处理例如可利用具有两个独立离子化时间参数的交替参数设置。在示例性实施例中，如上所述，这可被用于跨仪器的整个离子化时间参数能力地为质量分析仪部件设置两个范围参数，以便更快地响应质量分析仪部件中离子输出改变的更宽范围。在示例性实施例中，为了实现低浓度样本的高灵敏性，第一参数设置可包括具有可以更接近为分析所允许的最大离子化时间的长离子化时间的第一离子化参数。为了使高离子浓度样本的空间电荷最小化，第二参数设置可被配置成使用更短的离子化时间。当没有样本正被从样本入口部件引入时，仪器可在两个扫描间交替。当样本被引入并且探测到诸如特定离子和/或 TIC 的数据集参数时，可应用处理以判断后继处理是否应该开始修改参数设置，诸如以更长或更短的值优化离子化时间参数。这例如可以允许对提供给仪器的特定样本浓度更快地优化离子化时间。可分析以参数设置获取的数据集，从而判断参数设置是否应该被修改并且如果必要则还提供修改后的参数设置。

参考图 13 和 14，提供了判断参数设置是否应该被修改以及在确定修改时修改参数设置的示例性处理。这些示例性处理例如在图 9 和 12 的 S42、S44、S46、S102、S106 和 S108 中是有用的。参考图 13，例如，该处理开始于 S200，其中获取数据集的总离子流参数，并且该处理行进到在 S202 将数字滤波器应用到该数据集参数。示例性滤波器包括两极 Butterworth 算法，但是也可使用其他滤波器和/或不使用滤波器。处理从这里行进到 S204，其中判断总离子流是否

已经超过用户所预定的上阈值。如果已经超过上阈值，则在 S206 进行向上计数的递增，并且处理行进到 S208。

在 S208 中，判断总离子流是否已经超过下阈值。如果已经超过下阈值，则在 S210 进行下阈值之下的数据点的增量计数，并且处理行进到 S212。

在 S212，判断总离子流是否大于用户所预定的最大值。一旦判断超过最大值，则在 S214 中计算超过最大值的总次数。该处理然后在 S216 中对增量上限、增量向下计数和最大值求总和。

在 S216 之后，处理行进到 S218，其中判断是否需要获取更多数据点。如果确实需要获取更多数据点，则处理返回到 S200，并获取更多的数据点。如果不需要，则处理行进到图 14 中的 S220，其中将向上计数与预定极限进行比较，并且如果大于，则处理行进到 S222，其中减小用于获取具有 S200 的总离子流参数的数据集的参数设置的离子化时间参数。在参数设置修正后，处理行进到 S224，其中判断修改后的离子化时间是否小于最小离子化时间。如果修改后的时间小于最小离子化时间，则处理行进到 S226，其中最小离子化时间被设置在修改后的参数中，然后存储修改后的参数。如果修改后的离子化时间大于最小值，则存储修改后的参数设置以用在后继的分析中。

参考 S220，如果向上计数小于或等于所述极限，则处理行进到 S228，其中判断所记录的最大值是否大于该极限。如果最大值大于该极限，则如上所述处理行进到 S222。如果最大值小于该极限，则处理行进到 S230，其中将总值与总值极限进行比较。如果确定总和大于该极限，则如上所述处理行进到 S222。如果其小于该极限，则处理行进到 S232，用于判断较低计数是否小于该极限。如果较低计数小于该极限，则处理行进到 S234，其中修改用于获取数据集的参数设置的离子化时间参数以增大离子化时间。

该处理然后行进到 S236，其中判断修改后的离子化时间参数是否大于预定最大值。如果其大于最大值，则处理行进到 S238，其中设置最大离子化时间参数并存储修改后的参数。如果其小于最大值，则在 S240 中保存修改后的设置。

再次参考 S232，如果下计数极限大于该极限，则处理行进到 S242，其中存储用于获取具有总离子流参数的数据集的相同参数，以用于后继分析。

在一个示例性实施例中，在这些参数修改后，利用修改后的参数所获取的数据集参数可以如上面参考图 9 和 12 所述的那样被定标，以解释修改后的参数。

在一个示例性实施例中，定标因子可与诸如在分析期间修改和/或利用的离子化时间参数反相关。在示例性实施例中，丰度参数数据可反映分析期间样本分析物离子的浓度。例如，如果使用长的离子化时间参数，则它可以指示存在低浓度样本，并因此数据可能是低丰度的。如果存在浓缩的样本，则可使用更短的离子化时间参数以达到相同的阈值，并因此数据可被定标为反映更高的丰度。

参考图 15，显示了具有不同分析的离子源参数、离子传送门参数和质量分析仪部件参数的示例性表示。可在图 9 和 12 的背景下阅读图 15，其中 N-2 表示获取 N 的两个前的获取，N-1 表示获取 N 的一个前的获取，而扫描 N 表示最近的获取。

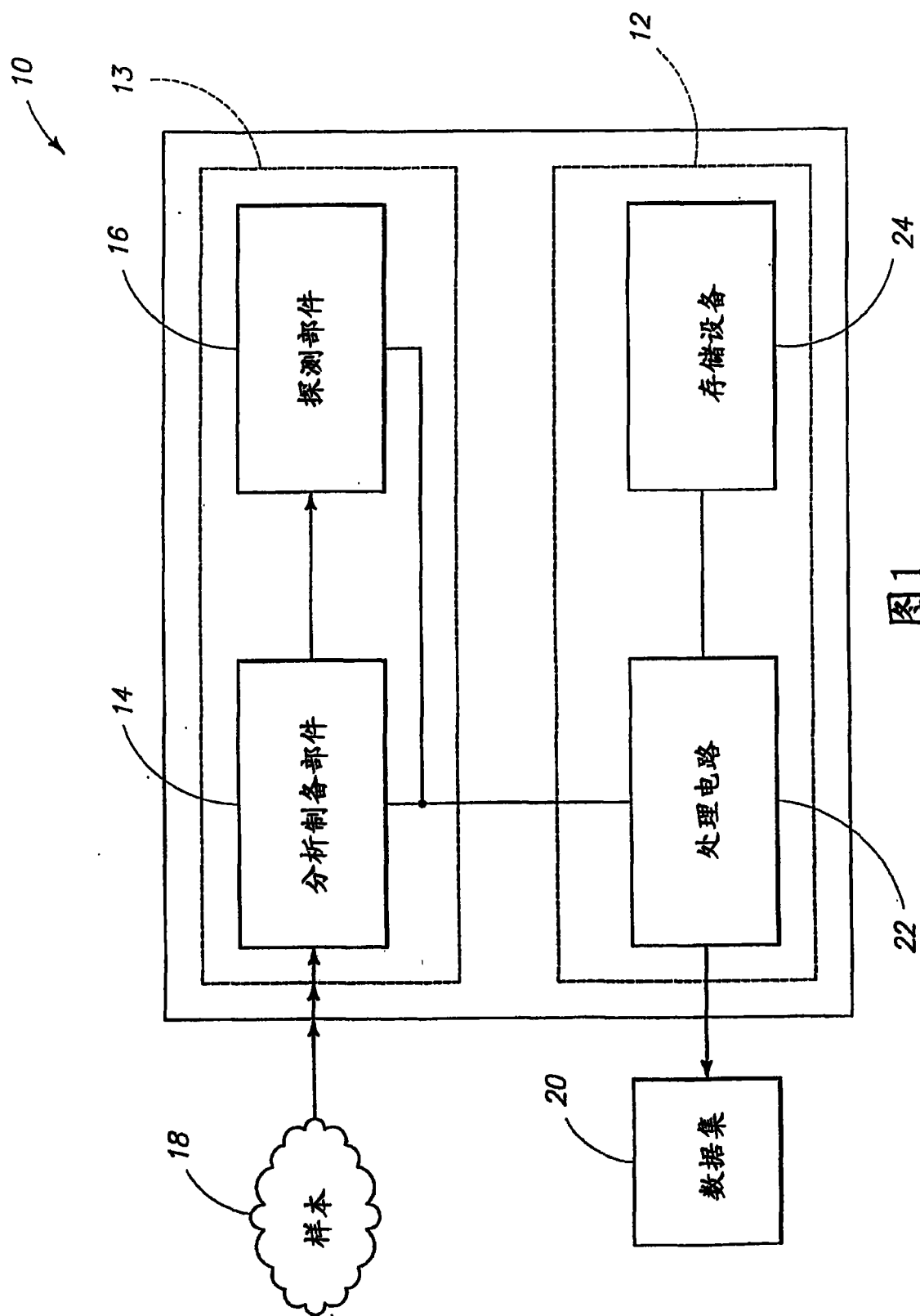


图1

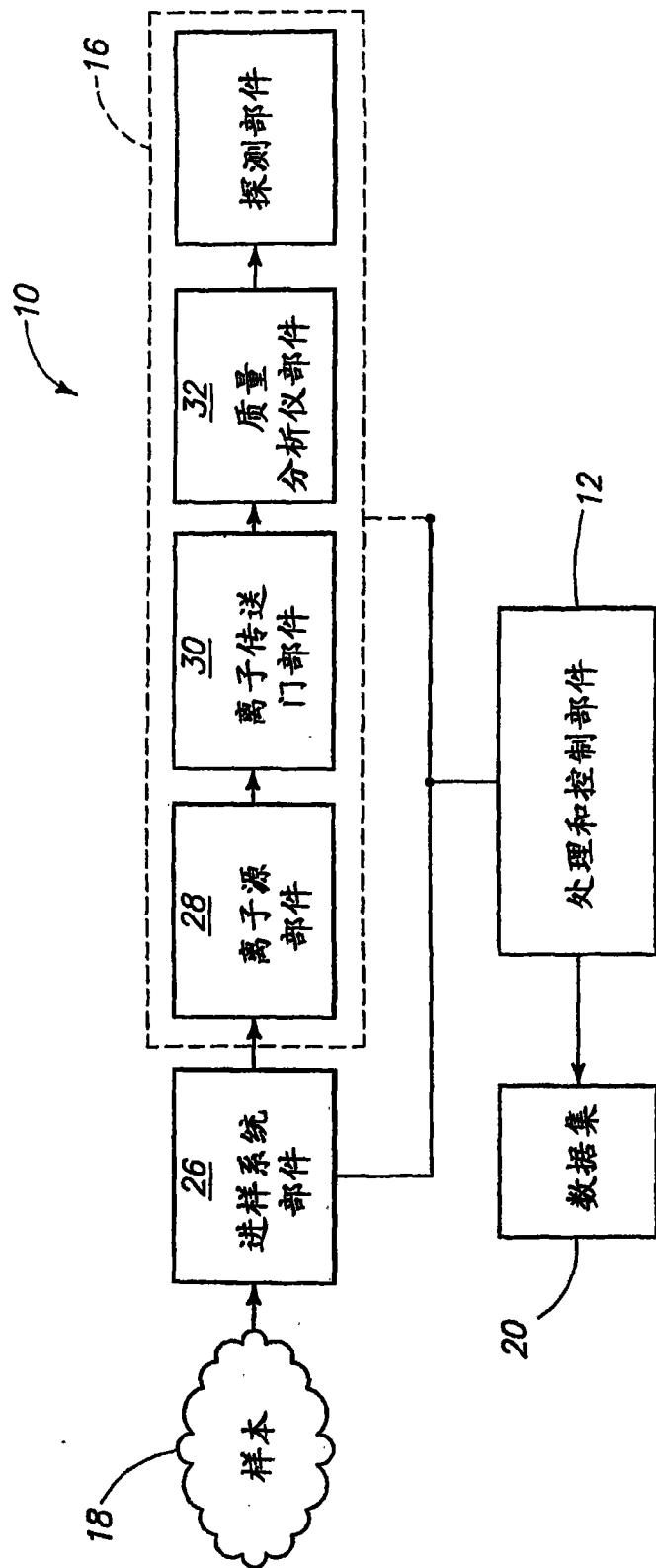


图2

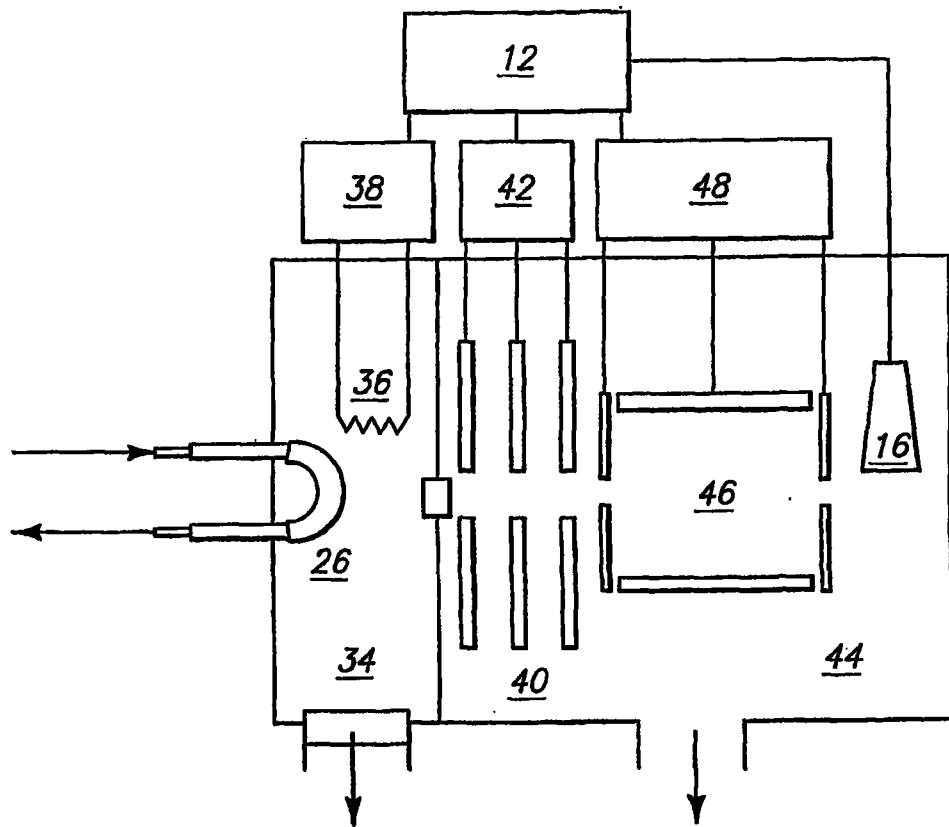


图 3

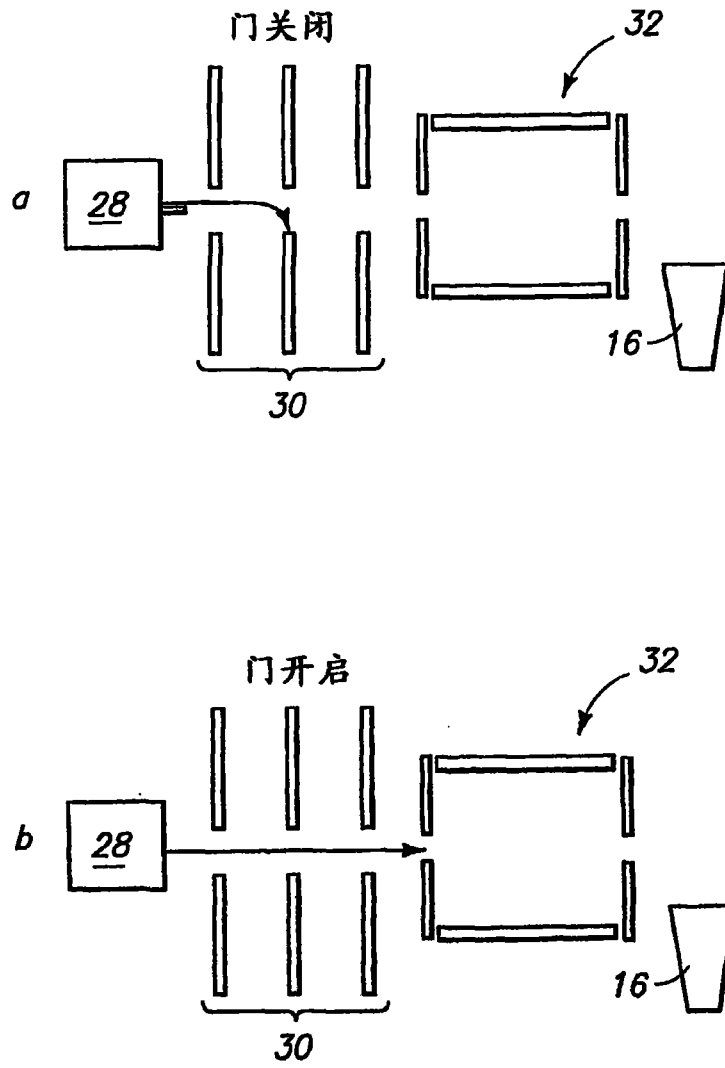


图 4

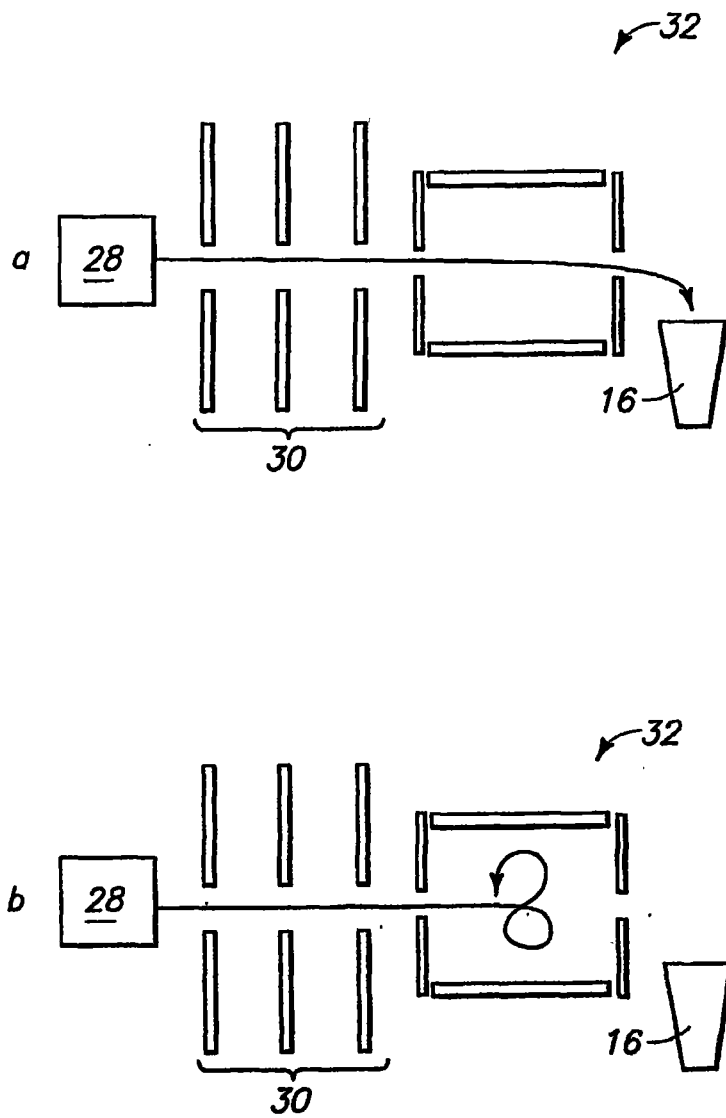


图5

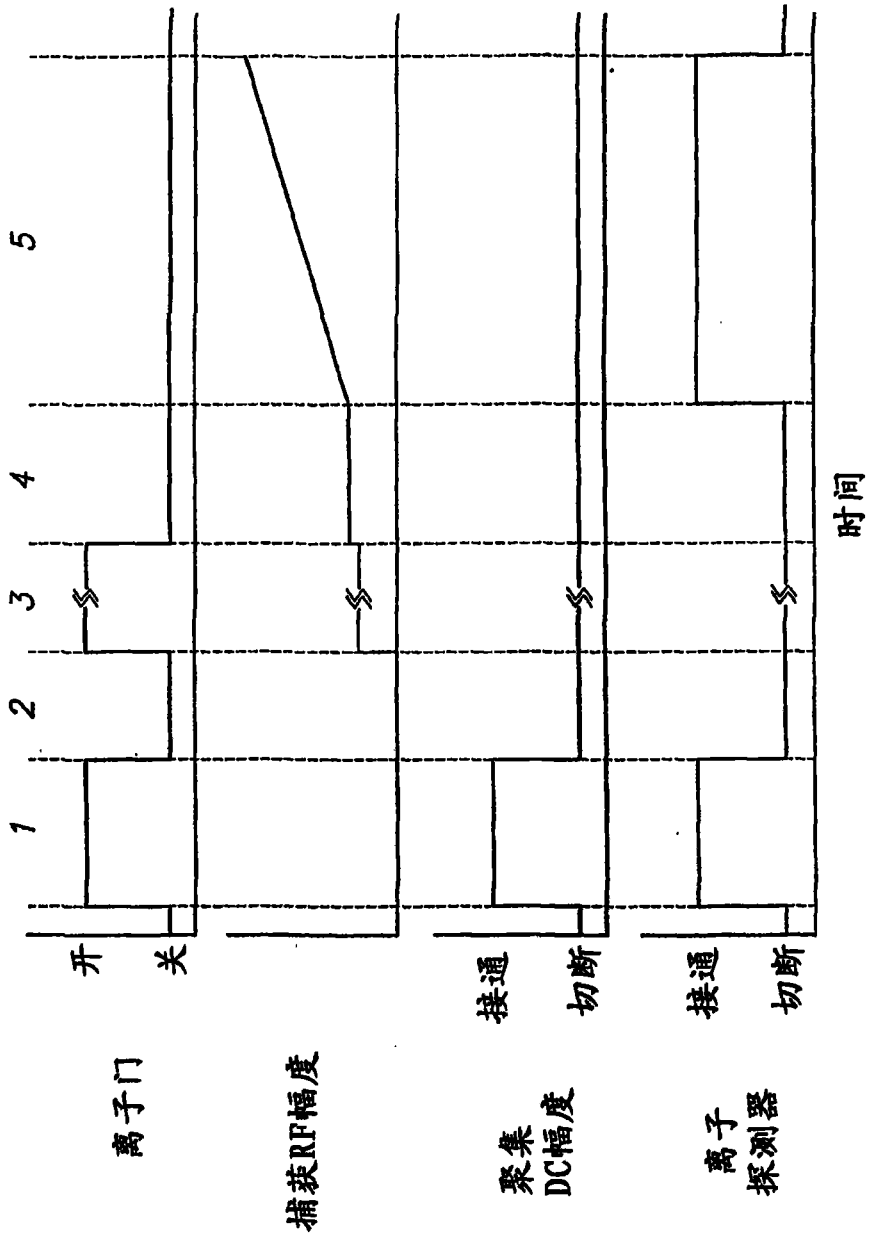


图6

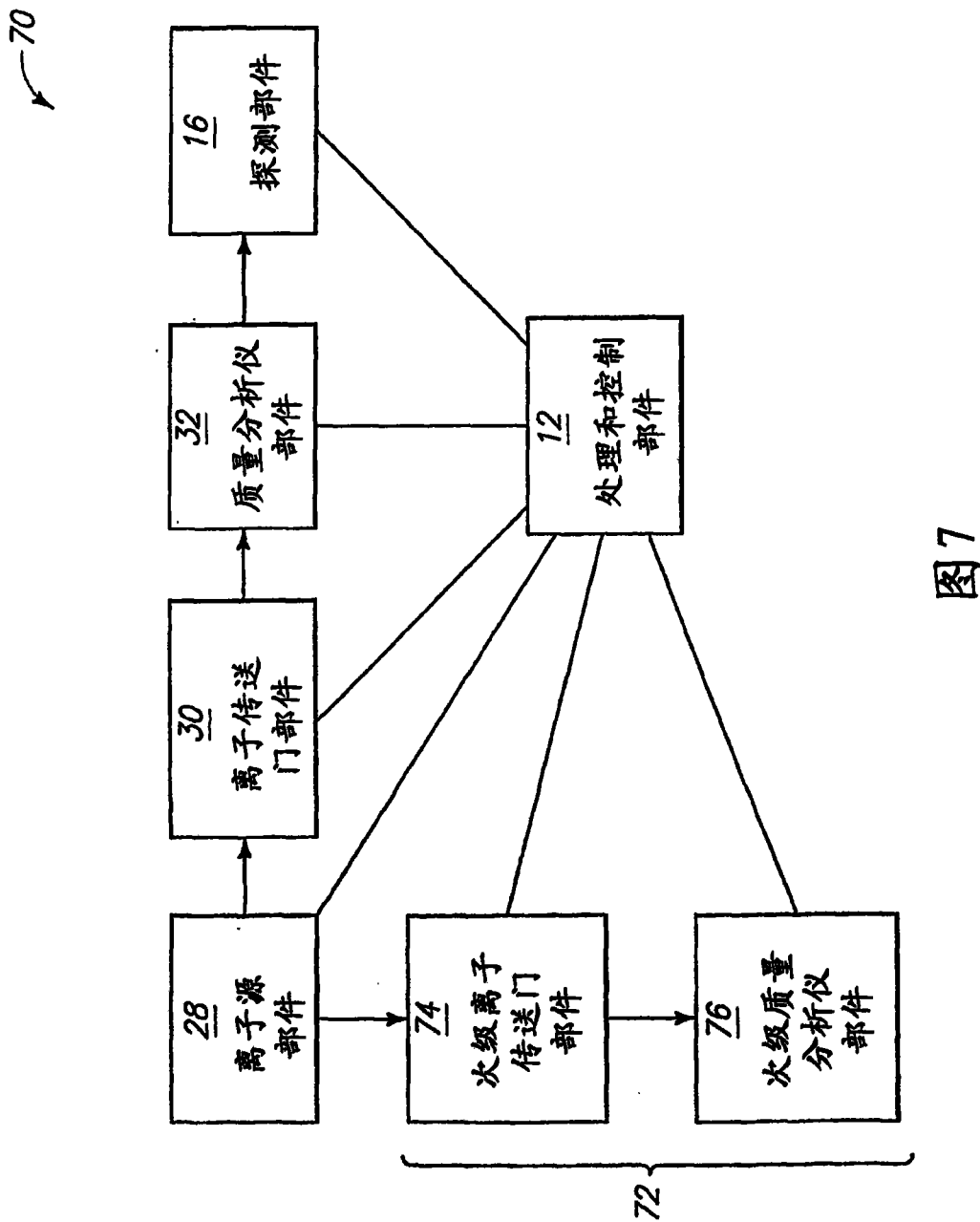


图7

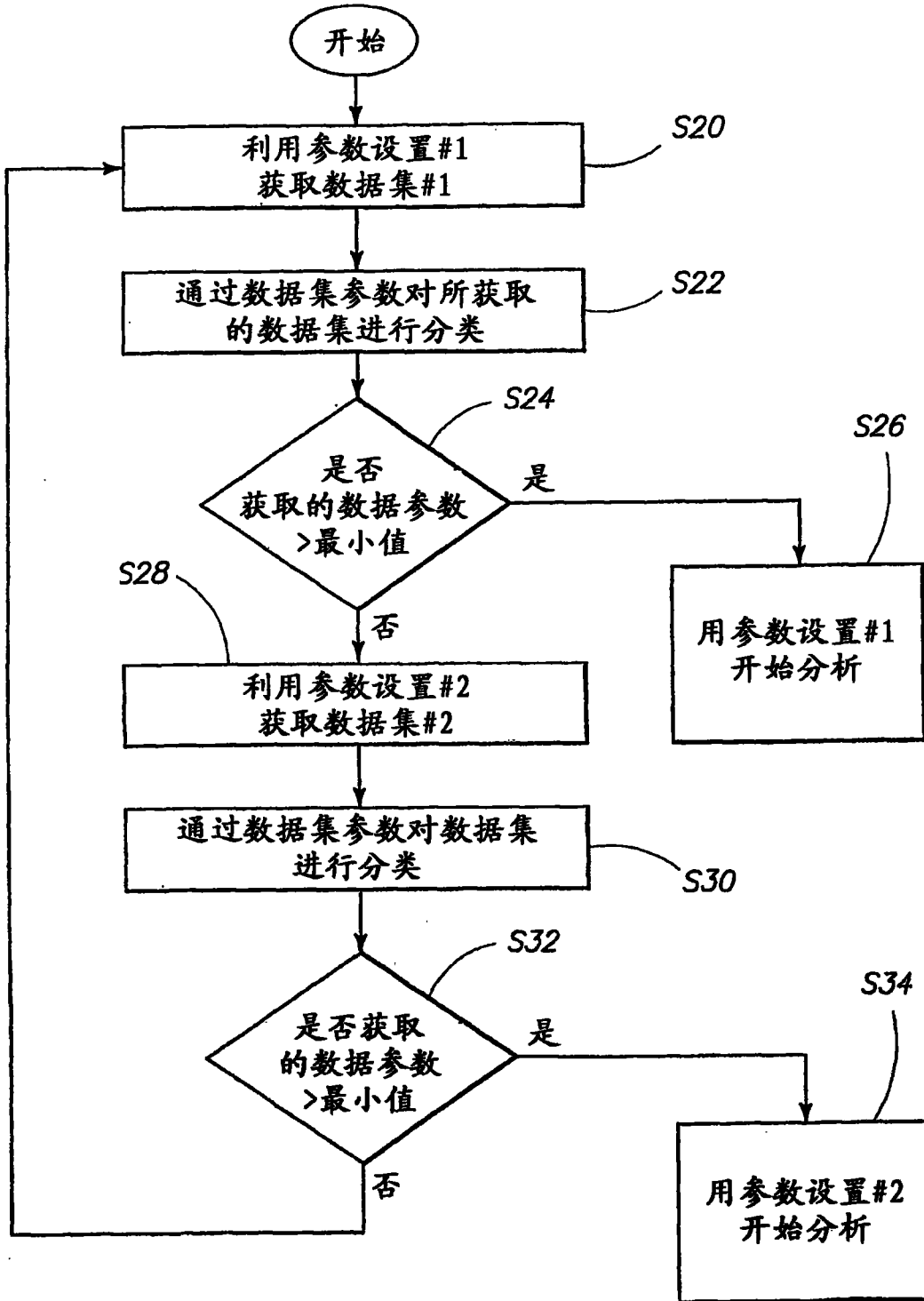


图 8

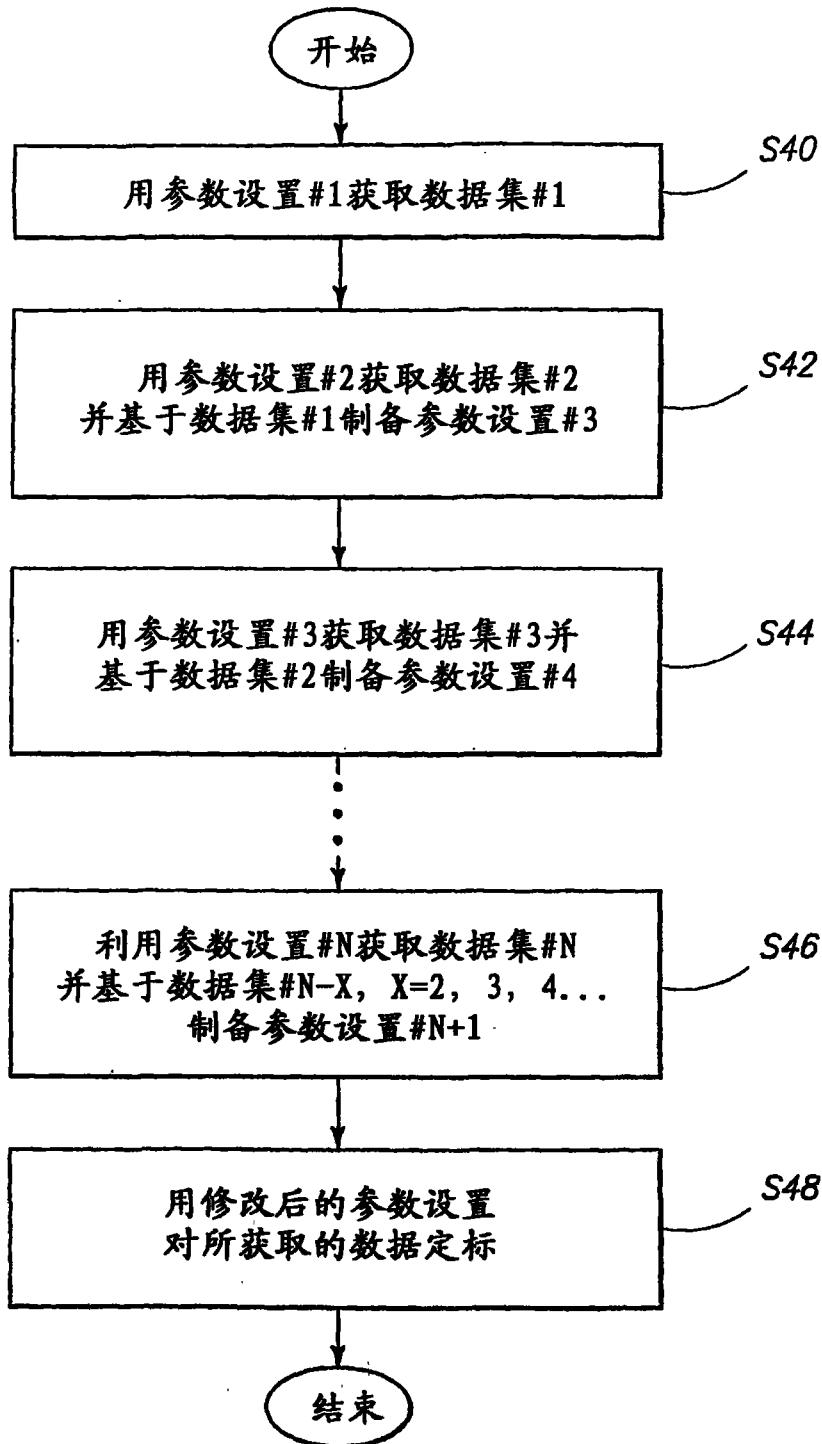


图9

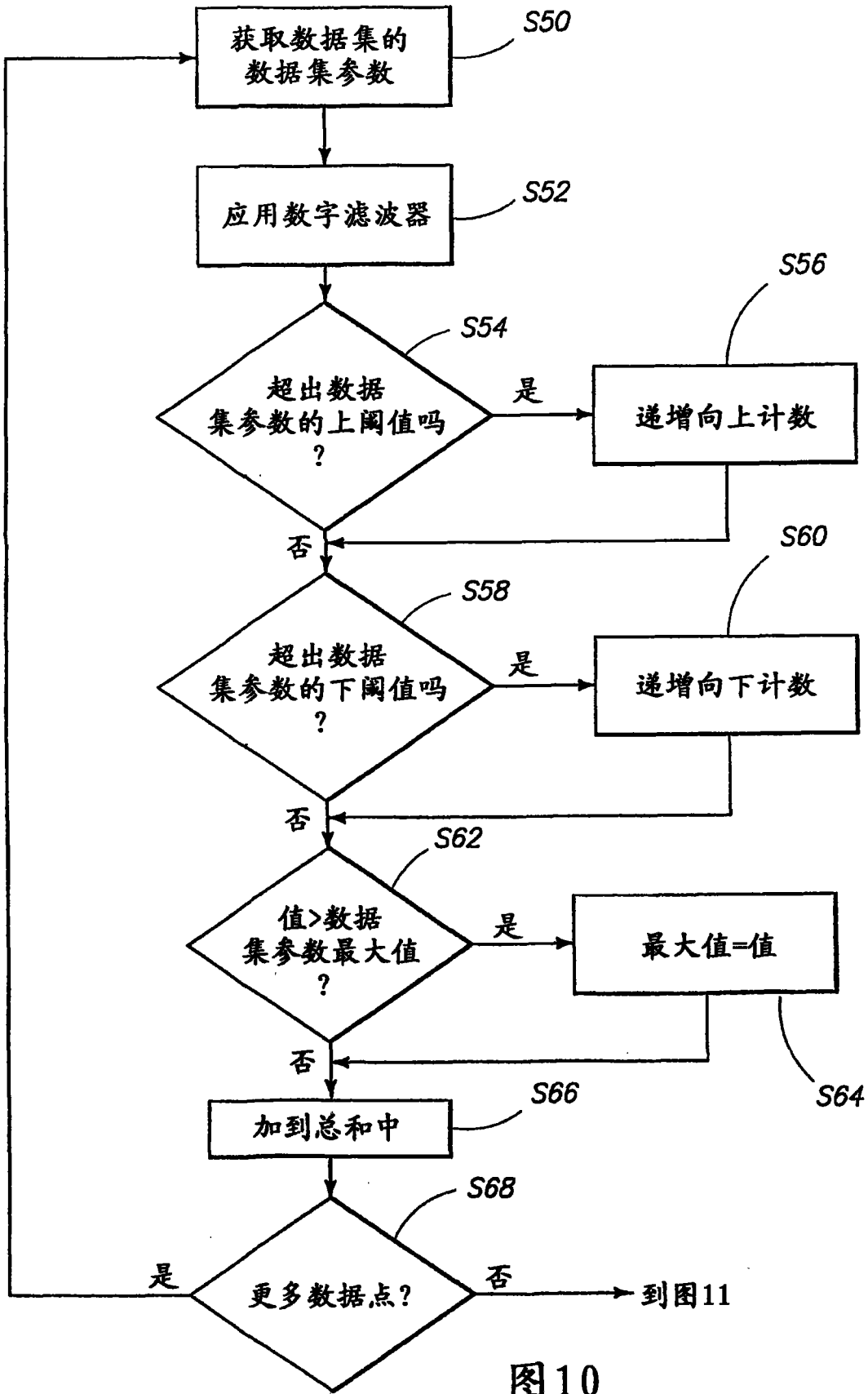


图10

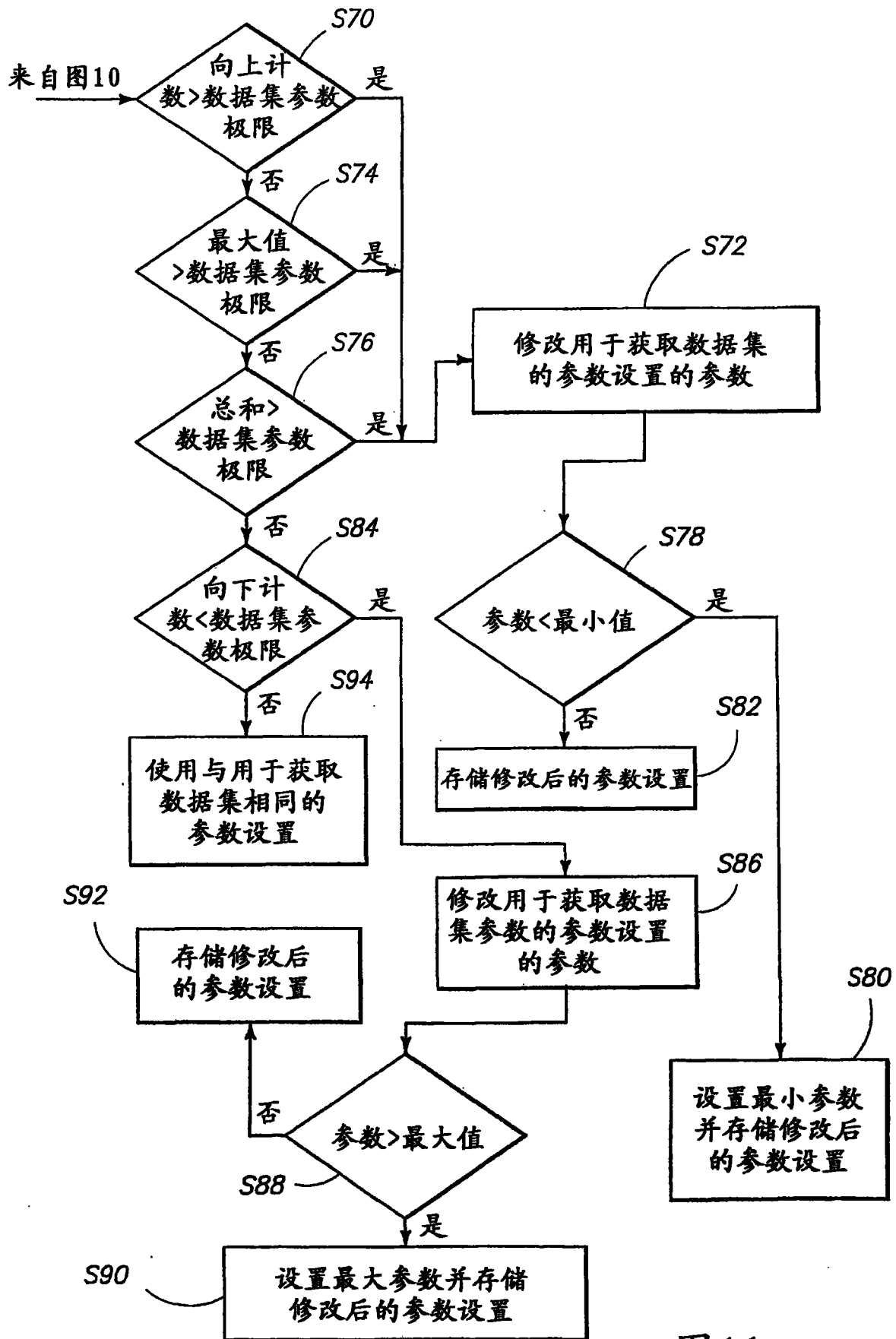


图 11

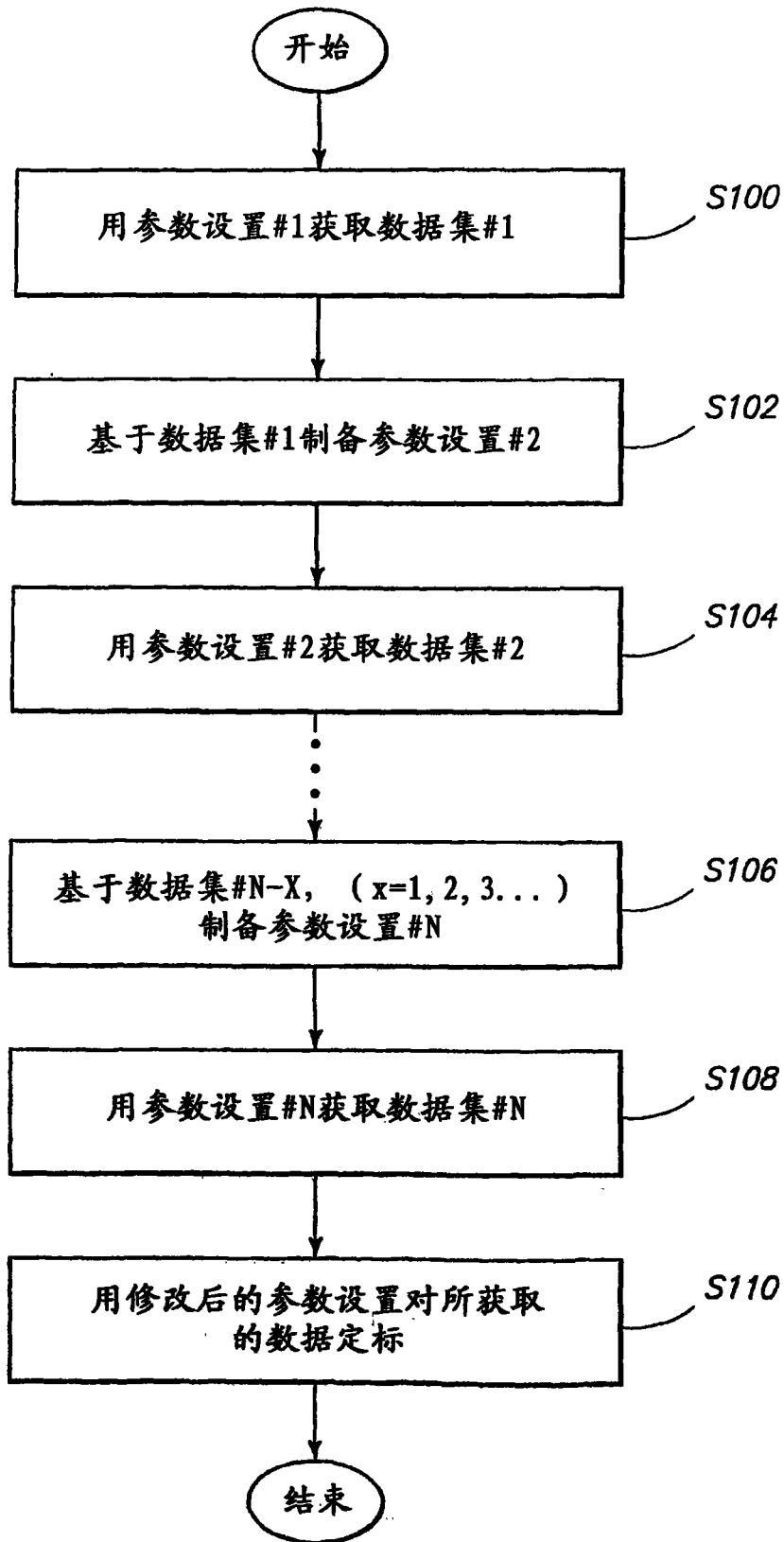


图12

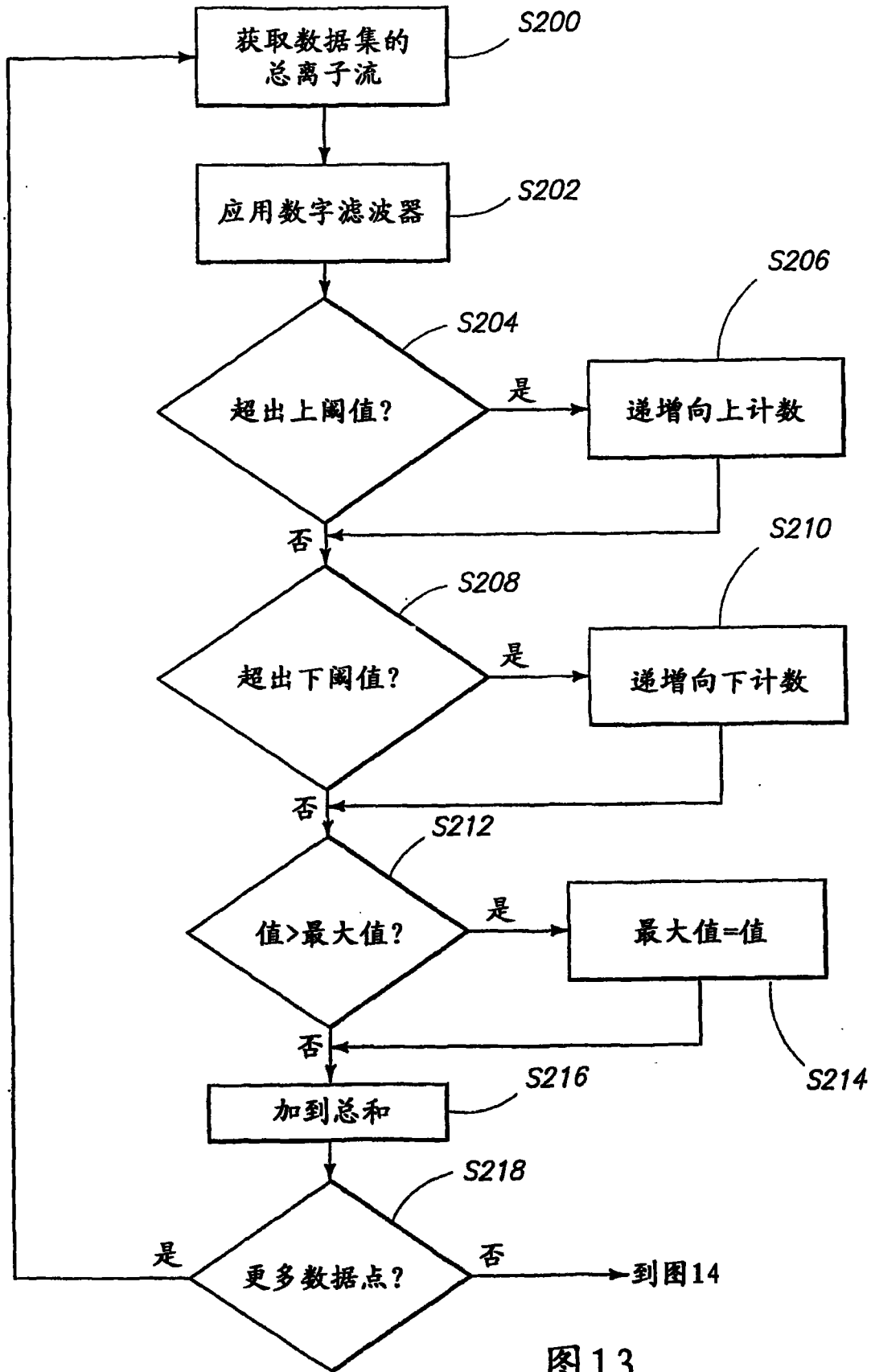


图13

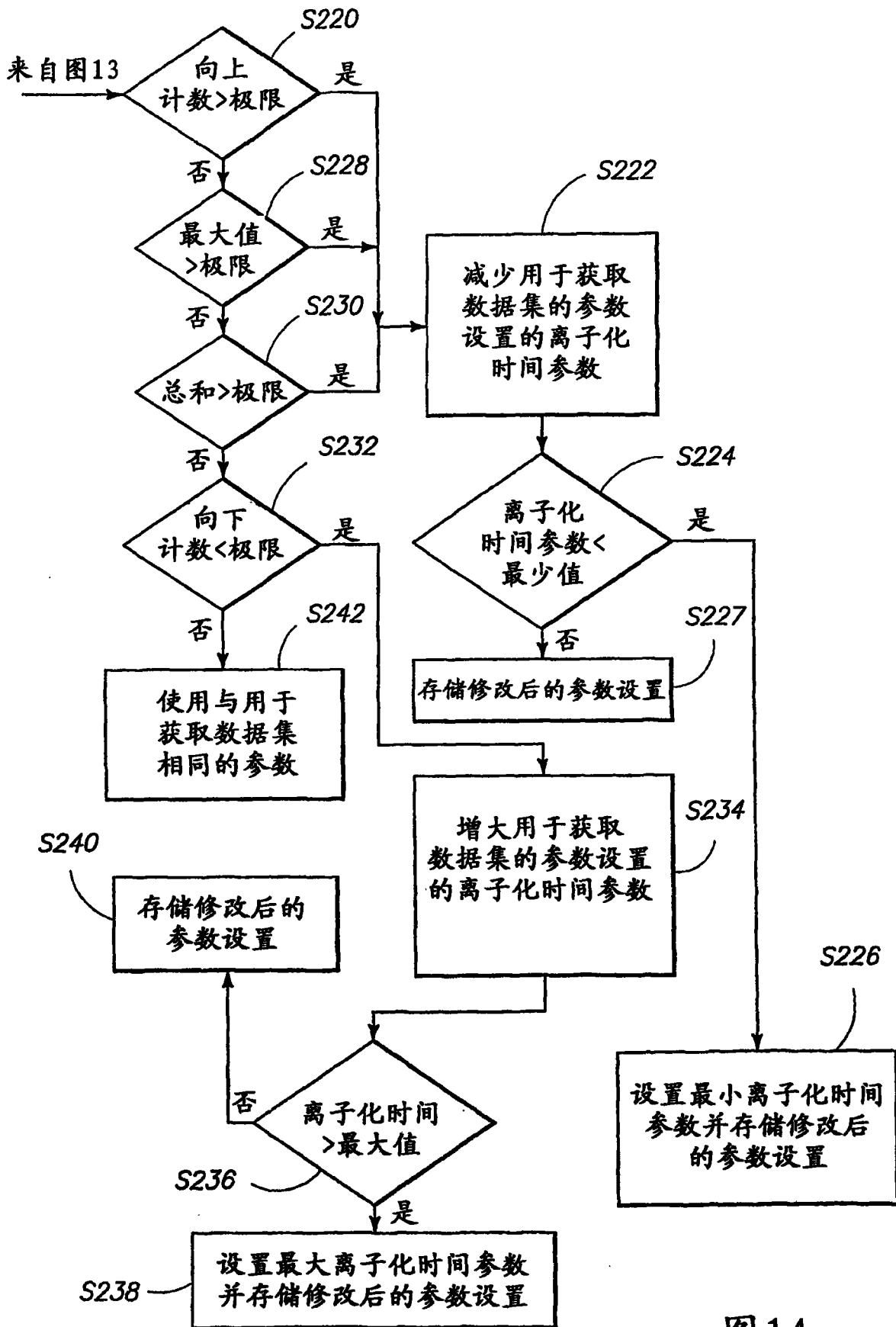


图14

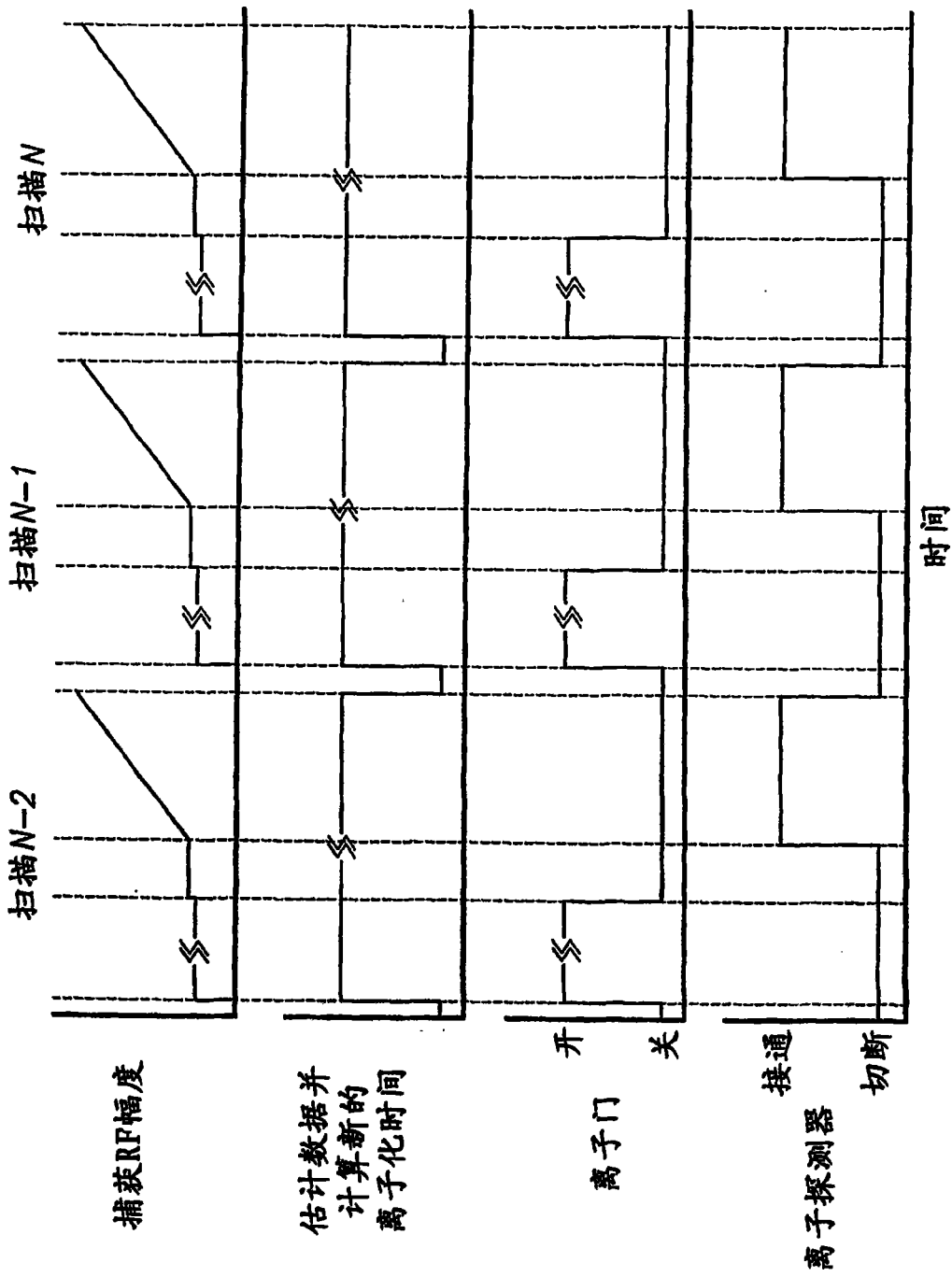


图15