

【公報種別】特許法第17条の2の規定による補正の掲載

【部門区分】第6部門第1区分

【発行日】平成28年5月19日(2016.5.19)

【公表番号】特表2015-512520(P2015-512520A)

【公表日】平成27年4月27日(2015.4.27)

【年通号数】公開・登録公報2015-028

【出願番号】特願2015-503878(P2015-503878)

【国際特許分類】

G 01 R 33/32 (2006.01)

G 01 N 24/08 (2006.01)

【F I】

G 01 N 24/02 5 3 0 J

G 01 N 24/02 5 3 0 Z

G 01 N 24/02 5 3 0 K

G 01 N 24/08 5 1 0 M

G 01 N 24/08 5 1 0 P

【手続補正書】

【提出日】平成28年3月18日(2016.3.18)

【手続補正1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項1】

試料中の物質の同定のための方法であって、

a) 少なくとも1つのNMR活性原子核を有する少なくとも1つの物質を含有する試料のNMRスペクトルを得る工程と、

b) 前記NMRスペクトルを別個のスペクトル値に変換する工程であって、各スペクトル値が、前記NMRスペクトルの個々のラインまたは前記NMRスペクトルの個々のスペクトル部分の高さおよび／もしくは面積を規定する積分値と、前記NMRスペクトルにおける検討されるラインまたは検討されるスペクトル部分の位置を規定する位置値とを有する工程と、

c) 多数の積分比値を、いずれの場合も前記NMRスペクトルの2つの積分値から求める工程であって、各積分比値が、基礎をなすスペクトル値の高さおよび／もしくは面積の比を規定する工程と、

d) 多数の距離値を、いずれの場合も前記NMRスペクトルの2つの位置値から求める工程であって、各距離値が、前記基礎をなすスペクトル値間のスペクトル距離を規定する工程と、

e) 前記NMRスペクトルの前記積分比値と、少なくとも1つの基準物質のNMR基準スペクトルの対応する積分比値とを比較する工程と、

f) 第1の適切なサブセットを前記NMRスペクトルの前記積分比値から選択する工程であって、前記第1のサブセットが、それぞれの場合において設定可能である第1の許容限界内の前記NMR基準スペクトルの積分比値に対応する積分比値を含む工程と、

g) 前記NMRスペクトルの前記距離値と、前記NMR基準スペクトルの対応する距離値とを比較する工程と、

h) 第2の適切なサブセットを前記NMRスペクトルの前記距離値から選択する工程であって、前記第2のサブセットが、それぞれの場合において設定可能である第2の許容限

界内の前記NMR基準スペクトルの距離値に対応する距離値を含む工程と、

i) 第1のサブセットと第2のサブセットを比較し、同じスペクトル値から形成した、両方のサブセットからのそれら積分比値および距離値を第3の適切なサブセットとして選択する工程と、

j) 前記第3のサブセットの前記各値の質判定基準を用いて、前記試料中に含まれる前記物質が、前記基準物質として同定されるか否かを決定する工程であって、前記判定基準が、これらの各値と、前記NMR基準スペクトルの前記積分比値および／または前記距離値とを比較することにより決定される工程とを含む方法。

【請求項2】

請求項1に記載の方法において、前記NMR基準スペクトルが、1つだけの基準物質のNMRスペクトルであることを特徴とする方法。

【請求項3】

請求項1または2に記載の方法において、前記質判定基準が、前記NMR基準スペクトルの前記積分比値と前記NMRスペクトルの前記積分比値とのずれ、および／または前記NMR基準スペクトルの前記距離値と前記NMRスペクトルの前記距離値とのずれの尺度を含むことを特徴とする方法。

【請求項4】

請求項1～3のいずれか一項に記載の方法において、前記質判定基準が、前記NMR基準スペクトルの積分比値または距離値の数と比較した、前記第3のサブセットの値の数の尺度を含むことを特徴とする方法。

【請求項5】

請求項1～4のいずれか一項に記載の方法において、前記工程e)～j)が、前記試料中に含まれる前記物質が基準物質として同定されるまで、または、NMR基準スペクトルがもうそれ以上存在しなくなるまで他の基準物質のさらなるNMR基準スペクトルを用いて繰り返されることを特徴とする方法。

【請求項6】

請求項1～5のいずれか一項に記載の方法において、前記距離値が、前記位置値の直接の差として、前記位置値の標準化された差としてまたは前記位置値の商として計算されることを特徴とする方法。

【請求項7】

請求項1～6のいずれか一項に記載の方法において、前記試料中に含まれる前記物質が、量的に同定されることを特徴とする方法。

【請求項8】

請求項1～7のいずれか一項に記載の方法において、前記方法が、デカップリングしたNMRスペクトルを用いて行われ、前記物質が明白に同定されていない場合には、同じ試料のデカップリングしないNMRスペクトルを用いることにより再度行われることを特徴とする方法。

【請求項9】

コンピュータで実行されたとき、請求項1～8のいずれか一項に記載の方法を行うようコーディングされたプログラムを含むソフトウェアを有するソフトウェア製品。