

【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 0 1 R 33/32 (2006.01)

G 0 1 N 24/08 (2006.01)

【 F I 】

G 0 1 N 24/02 5 3 0 J

G 0 1 N 24/02 5 3 0 Z

G 0 1 N 24/02 5 3 0 K

G 0 1 N 24/08 5 1 0 M

G 0 1 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值および距離値を第 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值および / 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值と前記 NMR スペクトルの前記積分比值とのずれ、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值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。