

【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20年12月18日(2008.12.18)

【公表番号】特表2008-522161(P2008-522161A)

【公表日】平成20年6月26日(2008.6.26)

【年通号数】公開・登録公報2008-025

【出願番号】特願2007-543516(P2007-543516)

【国際特許分類】

G 01 N 27/62 (2006.01)

H 01 J 49/38 (2006.01)

【F I】

G 01 N 27/62 D

G 01 N 27/62 K

H 01 J 49/38

【手続補正書】

【提出日】平成20年10月24日(2008.10.24)

【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】

質量分析データを処理する方法であって、

a. 質量電荷比の範囲に関して時間領域の質量分析データのセットを取得するステップと、

b. その取得された時間領域データのサブセットを周波数領域に変換するステップと、

c. 第1のしきい値を前記周波数領域データのサブセットに適用して、前記範囲の質量電荷比を有するイオンの存在を示すピークデータからノイズデータを識別するステップと、

d. 前記取得された時間領域データの全データセットを実質的に周波数領域に変換するステップと、

e. ピークデータを含めるためにステップ(c)において識別された前記変換済みデータサブセットの領域に対応するその変換済み全データセット内の領域を識別するステップとを備えることを特徴とする方法。

【請求項2】

請求項1に記載の方法であって、

前記ステップ(e)において識別された領域内にある前記変換済み全データセットからデータを格納するステップおよび/または表示するステップと、それらの領域外のデータをノイズとして拒否するステップとをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項3】

請求項1または請求項2に記載の方法であって、第2のしきい値を周波数領域の前記変換済み全データセットに適用するが、その前記識別された領域のみに適用するステップをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項4】

質量分析データを処理する方法であって、

a. 質量電荷比(m/z)の範囲に関して時間領域において取得された質量分析データの第1のセットを周波数領域に変換するステップと、

b . 質量分析データの前記第1のセットとは異なる、時間領域の質量分析データの第2のセットを周波数領域に変換するステップと、

c . 周波数領域のデータの各セットに共通のピークを識別するように、周波数領域の質量分析データの前記第1のセットを周波数領域の質量分析データの前記第2のセットと相關させるステップとを備えることを特徴とする方法。

【請求項5】

請求項4に記載の方法であって、時間領域の質量分析データの前記第1および第2のセットは各々時間領域の全データセットの異なるサブセットを備え、前記方法は、質量分析データの前記第1および第2のセットを相關させるステップ(c)の後に、

d . 前記時間領域からの全データセットのすべてを実質的に周波数領域に変換するステップと、

e . 前記範囲内の質量電荷比を有するイオンの存在を示すピークデータからノイズデータを識別する第1のしきい値を前記変換済み全データセットに適用するステップであって、前記第1のしきい値は前記ピークの領域のみに適用されるステップとをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項6】

請求項5に記載の方法であって、各識別されたピークの領域外にある前記変換済み全データセットのデータをノイズデータとして拒否するステップをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項7】

請求項5または請求項6に記載の方法であって、前記第1および第2の時間領域データセットは実質的に、時間領域の前記全データセットの非重複サブセットであることを特徴とする方法。

【請求項8】

請求項5または請求項6に記載の方法であって、前記第1および第2の時間領域データセットは相互に重複することを特徴とする方法。

【請求項9】

請求項8に記載の方法であって、時間領域の前記第1のデータセットは前記第2のセットのサブセットであるか、またはその逆であることを特徴とする方法。

【請求項10】

請求項5または請求項6に記載の方法であって、質量分析データの前記第1および第2のセットのうちの少なくとも1つは、前記全データセットのサブセットではないことを特徴とする方法。

【請求項11】

請求項4から請求項10のいずれかに記載の方法であって、周波数領域の質量分析データの前記第1および第2のセットを相關させるステップ(c)は、

f . 周波数領域の質量分析データの前記第1のセットのピークの位置を、周波数領域の質量分析データの前記第2のセットのピークの位置と比較するステップと、

g . 周波数領域データの前記第1および第2のセットの各々で実質的に同じ位置を有するピークを識別するステップとを備えることを特徴とする方法。

【請求項12】

請求項4から請求項11のいずれかに記載の方法であって、周波数領域の質量分析データの前記第1および第2のセットを相關させるステップ(c)は、

h . 周波数領域の質量分析データの前記第1のセットのピークの位相を、周波数領域の質量分析データの前記第2のセットのピークの位相と比較するステップと、

i . 周波数領域データの前記第1および第2の各セットの間で整合性のある位相を有するピークを識別するステップとを備えることを特徴とする方法。

【請求項13】

請求項4から請求項12のいずれかに記載の方法であって、周波数領域の質量分析データの前記第1および第2のセットを相關させるステップ(c)は、前記第1の周波数領域

セットの質量分析データの実質的にすべてを、前記第2の周波数領域セットの質量分析データの実質的にすべてと比較するステップを備えることを特徴とする方法。

【請求項14】

請求項4に記載の方法であって、前記質量分析データを相関させるステップ(c)は、周波数領域のデータの前記第1のセットに第1のしきい値を適用するステップと、周波数領域のデータの前記第2のセットに第2のしきい値を適用するステップと、前記第1のしきい値を超える周波数領域の前記第1のセットの前記データを、前記第2のしきい値を超える周波数領域の前記第2のセットの前記データと比較するステップとを備えることを特徴とする方法。

【請求項15】

請求項1から請求項14のいずれか一項に記載の方法であって、前記第1のしきい値の適用に続いて、前記全データセットからのピークデータのみを格納するステップをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項16】

請求項5に記載の方法であって、前記範囲内の質量電荷比を有するイオンの存在を示すピークを識別するために周波数領域の前記第1および第2のデータセットを相関させる前記ステップ(c)に加えて、前記方法は、前記ステップ(d)に先立ち、

(h) 周波数領域の前記第1および第2のデータセットのうちの少なくとも1つに前記第1のしきい値よりも高い第2のしきい値を適用して、前記範囲内の質量電荷比を有するイオンの存在を示すが前記第1および第2のデータセットを相関させる前記ステップ(c)を通じて見い出されていないピークを識別するステップをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項17】

請求項5に記載の方法であって、前記範囲内の質量電荷比を有するイオンの存在を示すピークを識別するために周波数領域の前記第1および第2のデータセットを相関させる前記ステップ(c)に加えて、前記方法は、前記ステップ(e)に先立ち、

(i) 前記全データセットから、各識別されたピークに関連するデータを差し引くステップと、

(j) 第2のしきい値を前記全データセットの残りのデータに適用するステップとをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項18】

請求項14または請求項15に記載の方法であって、前記第1のしきい値を超えるピークデータおよび前記第2のしきい値を超えるピークデータを格納するステップと、前記全データセットからの前記残りのデータをノイズとして拒否するステップとをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項19】

質量分析データを処理する方法であって、

(a) 質量電荷比の範囲に関して時間領域の質量分析データのセットを取得するステップと、

(b) その取得された時間領域データの第1のサブセットを周波数領域に変換するステップと、

(c) その取得された時間領域データの第2サブセットを周波数領域に変換するステップと、

(d) 前記取得された時間領域データの全データセットを実質的に周波数領域に変換するステップと、

(e) 周波数領域の前記第1および第2のサブセットのうちの少なくとも1つに第1のしきい値を適用して、ピークデータを含むそのデータの1つまたは複数の領域を識別するステップと、

(f) 周波数領域のデータの前記第1のサブセットを周波数領域のデータの前記第2のサブセットと相関させて、各々の前記サブセットに共通のデータの1つまたは複数の領域

を識別するステップとを備えることを特徴とする方法。

【請求項 2 0】

請求項 1 9 に記載の方法であって、前記ステップ(e)または前記ステップ(f)によって識別された前記領域または各領域に対応する前記変換済み全データセットのデータの 1 つまたは複数の領域を識別するステップをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項 2 1】

請求項 1 9 に記載の方法であって、前記ステップ(e)、およびさらに前記ステップ(f)によって識別された前記領域または各領域に対応する前記変換済み全データセットのデータの 1 つまたは複数の領域を識別するステップをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項 2 2】

請求項 2 0 または請求項 2 1 に記載の方法であって、前記ステップ(e)および / または前記ステップ(f)によって識別された前記変換済み全データセットからのデータの前記領域を格納するステップをさらに備えることを特徴とする方法。

【請求項 2 3】

プログラム要素を備えるコンピュータプログラムであって、前記プログラムは実行されると、請求項 1 から請求項 2 2 のいずれか一項に記載の方法を実施することを特徴とするコンピュータプログラム。

【請求項 2 4】

請求項 2 3 に記載のコンピュータプログラムを含むことを特徴とするコンピュータプログラム製品。

【請求項 2 5】

請求項 1 から請求項 2 2 のいずれかに記載の方法を実施するように構成されたデータ処理手段を含むことを特徴とするフーリエ変換質量分析機。