

【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】令和1年8月8日(2019.8.8)

【公開番号】特開2018-136266(P2018-136266A)
 【公開日】平成30年8月30日(2018.8.30)
 【年通号数】公開・登録公報2018-033
 【出願番号】特願2017-32441(P2017-32441)
 【国際特許分類】

G 0 1 N 27/62 (2006.01)

【F I】

G 0 1 N 27/62 D

G 0 1 N 27/62 X

【手続補正書】

【提出日】令和1年6月26日(2019.6.26)

【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】

試料に含まれる1乃至複数の目的成分を、それぞれ1乃至複数の測定条件で選択イオンモニタリング測定及び/又は多重反応モニタリング測定する質量分析装置であって、

a) 複数の成分のそれぞれについて選択イオンモニタリング測定条件及び/又は多重反応モニタリング測定条件が予め保存された記憶部と、

b) 使用者により測定条件を記載したメソッドファイルの作成が指示されると、前記複数の成分の前記選択イオンモニタリング測定条件及び/又は多重反応モニタリング測定条件を読み出して画面に表示して使用者の選択を受け付ける測定条件選択受付部と、

c) 前記使用者に選択された測定条件を記載したメソッドファイルを作成するメソッドファイル作成部と

を備えることを特徴とする質量分析装置。

【請求項2】

前記複数の成分が、その成分の属性に応じて分類されており、

d) 使用者に前記属性を選択させる属性選択部

を備え、

前記測定条件選択受付部が、使用者による前記属性の選択に応じて当該属性に対応する成分の選択イオンモニタリング測定条件及び/又は多重反応モニタリング測定条件を前記測定条件選択受付部に表示させることを特徴とする請求項1に記載の質量分析装置。

【請求項3】

試料に含まれる複数の目的成分を時間的に分離するカラムを有するクロマトグラフを備えたクロマトグラフ質量分析装置であって、

前記選択イオンモニタリング測定条件及び/又は多重反応モニタリング測定条件に、当該測定の実行時間帯、及び該測定の1回あたりの実行時間であるデュエルタイムが含まれており、

e) 前記使用者により選択された測定条件に基づいて、試料の測定開始から測定終了までの全測定時間を、同じ時間帯に実行される選択イオンモニタリング測定及び/又は多重反応モニタリング測定の組み合わせが異なる複数の部分時間帯に分割する測定時間分割部と

f) 前記複数の部分時間帯のそれぞれにおいて実行される選択イオンモニタリング測定 / 及び多重反応モニタリング測定のデュアルタイムの合計時間であるループタイムを算出するループタイム算出部と

g) 前記算出したループタイムを使用者に提示するループタイム提示部と
を備えることを特徴とする請求項 1 又は 2 に記載の質量分析装置。

【請求項 4】

h) 前記ループタイム算出部により算出されたループタイムが予め決められた最大ループタイムよりも長い場合に、使用者に前記複数の成分の前記選択イオンモニタリング測定条件及び / 又は多重反応モニタリング測定条件の選択内容の変更、あるいは該測定条件の変更を促す再設定提示部

を備えることを特徴とする請求項 3 に記載の質量分析装置。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0011

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0011】

上記課題を解決するために成された本発明は、試料に含まれる 1 乃至複数の目的成分を、それぞれ 1 乃至複数の測定条件で選択イオンモニタリング測定及び / 又は多重反応モニタリング測定する質量分析装置であって、

a) 複数の成分のそれぞれについて選択イオンモニタリング測定条件及び / 又は多重反応モニタリング測定条件が予め保存された記憶部と、

b) 使用者により測定条件を記載したメソッドファイルの作成が指示されると、前記複数の成分の前記選択イオンモニタリング測定条件及び / 又は多重反応モニタリング測定条件を読み出して画面に表示して使用者の選択を受け付ける測定条件選択受付部と、

c) 前記使用者に選択された測定条件を記載したメソッドファイルを作成するメソッドファイル作成部と

を備えることを特徴とする。

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0012

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0012】

前記選択イオンモニタリング測定及び / 又は多重反応モニタリング測定における測定条件には、例えば、測定対象イオンの質量電荷比、当該測定の 1 回あたりの実行時間に関する情報が含まれる。前記測定条件選択受付部は、例えば、各測定条件をチェックボックスとともに一覧表示し、該チェックボックスへの入力（マウスクリック操作によるチェック）により選択を受け付けるように構成することができる。また、使用者がクリックすることにより表示色を変更して選択を受け付けるように構成することもできる。

【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0013

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0013】

本発明に係る質量分析装置では、複数の成分のそれぞれについて、予め選択イオンモニタリング（SIM）測定や多重反応モニタリング（MRM）測定において用いられる SIM 測定条件や MRM 測定条件が予め記憶部に保存されている。使用者がメソッドファイルの作成を指示すると、記憶部からライブラリに記載された測定条件が読み出され画面に一

覧表示される。測定条件選択受付部は、例えば上述のチェックボックスを表示し、該チェックボックスを介して各測定条件に対する使用者からの選択入力を受け付ける。使用者が、SIM測定やMRM測定において使用する測定条件を選択すると、選択された測定条件を記載したメソッドファイルがメソッドファイル作成部により作成される。このように、本発明に係る質量分析装置では、使用者自らが測定条件そのものを削除したり入力したりする必要がないため、容易にかつ正しくメソッドファイルを作成することができる。また、使用者が複数の測定条件を選択した場合に、メソッドファイルへの測定条件の記載順を使用者が適宜に変更可能な構成としてもよい。

【手続補正5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0014

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0014】

本発明に係る質量分析装置では、
前記複数の成分が、その成分の属性に応じて分類されており、

d) 使用者に前記属性を選択させる属性選択部
を備え、

前記測定条件選択受付部が、使用者による前記属性の選択に応じて当該属性に対応する成分の選択イオンモニタリング測定条件及び/又は多重反応モニタリング測定条件を前記測定条件選択受付部に表示させる

ことが好ましい。

【手続補正6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0016

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0016】

数十から数百種類もの目的成分を測定する多成分の一斉分析では、クロマトグラフのカラムで試料に含まれる目的成分を時間的に分離し、各目的成分がカラムから溶出する時間（保持時間）に当該目的成分のSIM測定やMRM測定を実行する。このとき、目的成分の種類が多くなると、複数のSIM測定時間帯やMRM測定時間帯が重なりあうことがある。こうした場合には、重複した時間帯内に設定された複数のチャンネルを1つずつ順に所定時間ずつ実行する動作が繰り返し行われる。各チャンネルの1回あたりの実行時間はデュエルタイム（dwell time）と呼ばれ、同じ時間帯に複数のチャンネルを各1回実行するのに要する合計時間はループタイム（loop time）と呼ばれる。使用者が選択した測定条件の実行時間帯が重複する数が多くなるほどループタイムが長くなる。ループタイムは、言い換えると各チャンネルでデータが取得される時間間隔でもあるため、この時間間隔が長くなりすぎるとクロマトグラムにおけるピークを構成する測定点数が不足してマスクロマトグラムのピークの再現性が悪くなり、目的成分を正しく分析することができなくなる。

【手続補正7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0031

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0031】

記憶部41には、複数の成分のそれぞれについて予め作成された1乃至複数のSIM測定条件及び/又はMRM測定条件が保存されており、また各成分の情報がその成分の属性（農薬、薬物等）に応じて分類されている。以下、これを「ライブラリ」と呼ぶ。また、

以下の説明には S I M 測定条件及び / 又は M R M 測定条件をまとめて「測定条件」とも呼ぶ。

【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0035

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0035】

使用者により目的成分の属性（本実施例では農薬）が選択されると、測定条件選択受付部 43 は、記憶部 41 のライブラリから農薬に分類されている成分の測定条件を読み出し、各測定条件に対する使用者の選択入力を受け付けるためのチェックボックス等の選択欄を付して表示部 6 に表示する。使用者による目的成分の属性の選択がない（例えば入力操作がスキップされた）場合には、測定条件選択受付部 43 は、ライブラリに保存されている全成分の測定条件を表示する。