

【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 7 部門第 1 区分

【発行日】令和 3 年 11 月 11 日 (2021.11.11)

【公表番号】特表 2020-535599 (P2020-535599A)

【公表日】令和 2 年 12 月 3 日 (2020.12.3)

【年通号数】公開・登録公報 2020-049

【出願番号】特願 2020-517087 (P2020-517087)

【国際特許分類】

H 0 1 J 49/00 (2006.01)

G 0 1 N 27/62 (2021.01)

H 0 1 J 49/42 (2006.01)

【F I】

H 0 1 J 49/00 4 0 0

G 0 1 N 27/62 X

H 0 1 J 49/00 3 6 0

H 0 1 J 49/42 1 5 0

H 0 1 J 49/42 2 5 0

H 0 1 J 49/42 8 0 0

【手続補正書】

【提出日】令和 3 年 9 月 24 日 (2021.9.24)

【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】

着目化合物に関する多重反応モニタリング (MRM) 遷移測定値が干渉を含むかどうかを判定するためのシステムであって、

着目化合物をイオン化し、1 つ以上の前駆イオンのイオンビームを生産する、イオン源デバイスと、

質量フィルタと、断片化デバイスと、質量分析器とを含み、かつ前記イオン源デバイスから前記イオンビームを受光する、タンデム質量分析計であって、前記質量フィルタは、前記イオンビームから前駆イオンの同位体を分解させることが可能である、質量選択ウィンドウを生産するように適合され、前記タンデム質量分析計は、前記質量フィルタを使用して前記 MRM 遷移の前駆イオンを選択し、前記断片化デバイスを使用して前記前駆イオンを断片化し、前記質量分析器を使用して前記 MRM 遷移のプロダクトイオンの強度を測定することによって、MRM 遷移の強度を測定するように適合される、タンデム質量分析計と、

前記タンデム質量分析計と通信するプロセッサであって、前記プロセッサは、

前記タンデム質量分析計に、第 1 の前駆イオンと、第 1 のプロダクトイオンとを含む、第 1 の MRM 遷移の第 1 の強度を測定するように命令することと、

前記タンデム質量分析計に、第 2 の前駆イオンと、同一の第 1 のプロダクトイオンとを含む、第 2 の MRM 遷移の第 2 の強度を、前記第 1 の MRM 遷移として測定するように命令することであって、前記第 2 の前駆イオンは、前記第 1 の前駆イオンの同位体である、ことと、

前記第 1 の強度と前記第 2 の強度の比率を計算することと、

第 1 の前駆イオンと前記第 2 の前駆イオンの数の理論比を、それらの同位体関係に従

って計算することと、

前記比率と前記理論比との間の差異を計算することと、

前記差異を閾値と比較することと、

前記差異が前記閾値未満である場合、前記第1のMRM遷移の前記第1の強度を、前記着目化合物のための干渉を含むものとして識別することと

を行う、プロセッサと

を備える、システム。

【請求項2】

前記質量フィルタは、 0.2 m/z 未満の幅の質量選択ウィンドウを生産するように適合される、請求項1に記載のシステム。

【請求項3】

前記質量フィルタは、 0.15 m/z 未満の幅の質量選択ウィンドウを生産するように適合される、請求項1に記載のシステム。

【請求項4】

前記質量フィルタは、四重極を備える、請求項1に記載のシステム。

【請求項5】

前記質量フィルタは、イオントラップを備える、請求項1に記載のシステム。

【請求項6】

前記質量フィルタは、ノッチフィルタを備える、請求項1に記載のシステム。

【請求項7】

前記質量フィルタは、ロッドの双曲線セットを備える、請求項1に記載のシステム。

【請求項8】

着目化合物に関する多重反応モニタリング(MRM)遷移測定値が干渉を含むかどうかを判定するための方法であって、

プロセッサを使用して、タンデム質量分析計に、イオンビームから、第1の前駆イオンと、第1のプロダクトイオンとを含む、着目化合物に関して、第1のMRM遷移の第1の強度を測定するように命令することであって、前記タンデム質量分析計は、質量フィルタと、断片化デバイスと、質量分析器とを含み、かつイオン源デバイスから前記イオンビームを受光し、前記質量フィルタは、前記イオンビームから前駆イオンの同位体を分解させることが可能である、質量選択ウィンドウを生産するように適合され、前記タンデム質量分析計は、前記質量フィルタを使用して前記MRM遷移の前駆イオンを選択し、前記断片化デバイスを使用して前記前駆イオンを断片化し、前記質量分析器を使用して前記MRM遷移のプロダクトイオンの強度を測定することによって、MRM遷移の強度を測定するように適合され、前記イオンビームは、前記着目化合物をイオン化する、イオン源デバイスによって生産される、ことと、

前記プロセッサを使用して、前記タンデム質量分析計に、前記イオンビームから、第2の前駆イオンと、同一の第1のプロダクトイオンとを含む、前記着目化合物に関して、第2のMRM遷移の第2の強度を、前記第1のMRM遷移として測定するように命令することであって、前記第2の前駆イオンは、前記第1の前駆イオンの同位体である、ことと、

前記プロセッサを使用して、前記第1の強度と前記第2の強度の比率を計算することと

、

前記プロセッサを使用して、第1の前駆イオンと前記第2の前駆イオンの数の理論比を、それらの同位体関係に従って計算することと、

前記プロセッサを使用して、前記比率と前記理論比との間の差異を計算することと、

前記プロセッサを使用して、前記差異を閾値と比較することと、

前記差異が前記閾値未満である場合、前記プロセッサを使用して、前記第1のMRM遷移の前記第1の強度を、前記着目化合物のための干渉を含むものとして識別することと

を含む、方法。

【請求項9】

前記質量フィルタは、 0.2 m/z 未満の幅の質量選択ウィンドウを生産するように適

合される、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 10】

前記質量フィルタは、 0.15 m/z 未満の幅の質量選択ウィンドウを生産するように適合される、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 11】

前記質量フィルタは、四重極を備える、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 12】

前記質量フィルタは、イオントラップを備える、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 13】

前記質量フィルタは、ノッチフィルタを備える、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 14】

前記質量フィルタは、ロッドの双曲線セットを備える、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 15】

非一過性かつ有形のコンピュータ可読記憶媒体を備えるコンピュータプログラム製品であって、前記コンピュータ可読記憶媒体のコンテンツは、着目化合物に関する多重反応モニタリング (MRM) 遷移測定値が干渉を含むかどうかを判定するための方法を実施するように、プロセッサ上で実行されている命令を伴うプログラムを含む、前記方法は、

システムを提供することであって、前記システムは、1 つ以上の明確に異なるソフトウェアモジュールを備え、前記明確に異なるソフトウェアモジュールは、測定モジュールと、分析モジュールとを含む、ことと、

タンデム質量分析計に、前記測定モジュールを使用して、イオンビームから、第 1 の前駆イオンと、第 1 のプロダクトイオンとを含む、着目化合物に関して、第 1 の MRM 遷移の第 1 の強度を測定するように命令することであって、前記タンデム質量分析計は、質量フィルタと、断片化デバイスと、質量分析器とを含み、かつイオン源デバイスから前記イオンビームを受光し、前記質量フィルタは、前記イオンビームから前駆イオンの同位体を分解させることが可能である、質量選択ウィンドウを生産するように適合され、前記タンデム質量分析計は、前記質量フィルタを使用して前記 MRM 遷移の前駆イオンを選択し、前記断片化デバイスを使用して前記前駆イオンを断片化し、前記質量分析器を使用して前記 MRM 遷移のプロダクトイオンの強度を測定することによって、MRM 遷移の強度を測定するように適合され、前記イオンビームは、前記着目化合物をイオン化する、イオン源デバイスによって生産される、ことと、

前記タンデム質量分析計に、前記測定モジュールを使用して、前記イオンビームから、第 2 の前駆イオンと、同一の第 1 のプロダクトイオンとを含む、前記着目化合物に関して、第 2 の MRM 遷移の第 2 の強度を、前記第 1 の MRM 遷移として測定するように命令することであって、前記第 2 の前駆イオンは、前記第 1 の前駆イオンの同位体である、ことと、

前記分析モジュールを使用して、前記第 1 の強度と前記第 2 の強度の比率を計算することと、

前記分析モジュールを使用して、第 1 の前駆イオンと前記第 2 の前駆イオンの数の理論比を、それらの同位体関係に従って計算することと、

前記分析モジュールを使用して、前記比率と前記理論比との間の差異を計算することと、

前記分析モジュールを使用して、前記差異を閾値と比較することと、

前記差異が前記閾値未満である場合、前記分析モジュールを使用して、前記第 1 の MRM 遷移の第 1 の強度を、前記着目化合物のための干渉を含むものとして識別することとを含む、コンピュータプログラム製品。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0008

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0008】

本出願人の教示のこれらおよび他の特徴が、本明細書に記載される。

本願明細書は、例えば、以下の項目も提供する。

(項目1)

着目化合物に関する多重反応モニタリング(MRM)遷移測定値が干渉を含むかどうかを判定するためのシステムであって、

着目化合物をイオン化し、1つ以上の前駆イオンのイオンビームを生産する、イオン源デバイスと、

質量フィルタと、断片化デバイスと、質量分析器とを含み、かつ前記イオン源デバイスから前記イオンビームを受光する、タンデム質量分析計であって、前記質量フィルタは、前記イオンビームから前駆イオンの同位体を分解させることが可能である、質量選択ウィンドウを生産するように適合され、前記タンデム質量分析計は、前記質量フィルタを使用して前記MRM遷移の前駆イオンを選択し、前記断片化デバイスを使用して前記前駆イオンを断片化し、前記質量分析器を使用して前記MRM遷移のプロダクトイオンの強度を測定することによって、MRM遷移の強度を測定するように適合される、タンデム質量分析計と、

前記タンデム質量分析計と通信するプロセッサであって、前記プロセッサは、

前記タンデム質量分析計に、第1の前駆イオンと、第1のプロダクトイオンとを含む、第1のMRM遷移の第1の強度を測定するように命令することと、

前記タンデム質量分析計に、第2の前駆イオンと、同一の第1のプロダクトイオンとを含む、第2のMRM遷移の第2の強度を、前記第1のMRM遷移として測定するように命令することであって、前記第2の前駆イオンは、前記第1の前駆イオンの同位体である、ことと、

前記第1の強度と前記第2の強度の比率を計算することと、

第1の前駆イオンと前記第2の前駆イオンの数の理論比を、それらの同位体関係に従って計算することと、

前記比率と前記理論比との間の差異を計算することと、

前記差異を閾値と比較することと、

前記差異が前記閾値未満である場合、前記第1のMRM遷移の前記第1の強度を、前記着目化合物のための干渉を含むものとして識別することと

を行う、プロセッサと

を備える、システム。

(項目2)

前記質量フィルタは、 0.2 m/z 未満の幅の質量選択ウィンドウを生産するように適合される、項目1に記載のシステム。

(項目3)

前記質量フィルタは、 0.15 m/z 未満の幅の質量選択ウィンドウを生産するように適合される、項目1に記載のシステム。

(項目4)

前記質量フィルタは、四重極を備える、項目1に記載のシステム。

(項目5)

前記質量フィルタは、イオントラップを備える、項目1に記載のシステム。

(項目6)

前記質量フィルタは、ノッチフィルタを備える、項目1に記載のシステム。

(項目7)

前記質量フィルタは、ロッドの双曲線セットを備える、項目1に記載のシステム。

(項目8)

着目化合物に関する多重反応モニタリング(MRM)遷移測定値が干渉を含むかどうか

を判定するための方法であって、

プロセッサを使用して、タンデム質量分析計に、イオンビームから、第1の前駆イオンと、第1のプロダクトイオンとを含む、着目化合物に関して、第1のMRM遷移の第1の強度を測定するように命令することであって、前記タンデム質量分析計は、質量フィルタと、断片化デバイスと、質量分析器とを含み、かつイオン源デバイスから前記イオンビームを受光し、前記質量フィルタは、前記イオンビームから前駆イオンの同位体を分解させることが可能である、質量選択ウィンドウを生産するように適合され、前記タンデム質量分析計は、前記質量フィルタを使用して前記MRM遷移の前駆イオンを選択し、前記断片化デバイスを使用して前記前駆イオンを断片化し、前記質量分析器を使用して前記MRM遷移のプロダクトイオンの強度を測定することによって、MRM遷移の強度を測定するように適合され、前記イオンビームは、前記着目化合物をイオン化する、イオン源デバイスによって生産される、ことと、

前記プロセッサを使用して、前記タンデム質量分析計に、前記イオンビームから、第2の前駆イオンと、同一の第1のプロダクトイオンとを含む、前記着目化合物に関して、第2のMRM遷移の第2の強度を、前記第1のMRM遷移として測定するように命令することであって、前記第2の前駆イオンは、前記第1の前駆イオンの同位体である、ことと、

前記プロセッサを使用して、前記第1の強度と前記第2の強度の比率を計算することと

、
前記プロセッサを使用して、第1の前駆イオンと前記第2の前駆イオンの数の理論比を、それらの同位体関係に従って計算することと、

前記プロセッサを使用して、前記比率と前記理論比との間の差異を計算することと、

前記プロセッサを使用して、前記差異を閾値と比較することと、

前記差異が前記閾値未満である場合、前記プロセッサを使用して、前記第1のMRM遷移の前記第1の強度を、前記着目化合物のための干渉を含むものとして識別することとを含む、方法。

(項目9)

前記質量フィルタは、 0.2 m/z 未満の幅の質量選択ウィンドウを生産するように適合される、項目8に記載の方法。

(項目10)

前記質量フィルタは、 0.15 m/z 未満の幅の質量選択ウィンドウを生産するように適合される、項目8に記載の方法。

(項目11)

前記質量フィルタは、四重極を備える、項目1に記載の方法。

(項目12)

前記質量フィルタは、イオントラップを備える、項目1に記載の方法。

(項目13)

前記質量フィルタは、ノッチフィルタを備える、項目1に記載の方法。

(項目14)

前記質量フィルタは、ロッドの双曲線セットを備える、項目1に記載の方法。

(項目15)

非一過性かつ有形のコンピュータ可読記憶媒体を備えるコンピュータプログラム製品であって、前記コンピュータ可読記憶媒体のコンテンツは、着目化合物に関する多重反応モニタリング(MRM)遷移測定値が干渉を含むかどうかを判定するための方法を実施するように、プロセッサ上で実行されている命令を伴うプログラムを含む、前記方法は、

システムを提供することであって、前記システムは、1つ以上の明確に異なるソフトウェアモジュールを備え、前記明確に異なるソフトウェアモジュールは、測定モジュールと、分析モジュールとを含む、ことと、

タンデム質量分析計に、前記測定モジュールを使用して、イオンビームから、第1の前駆イオンと、第1のプロダクトイオンとを含む、着目化合物に関して、第1のMRM遷移の第1の強度を測定するように命令することであって、前記タンデム質量分析計は、質量

フィルタと、断片化デバイスと、質量分析器とを含み、かつイオン源デバイスから前記イオンビームを受光し、前記質量フィルタは、前記イオンビームから前駆イオンの同位体を分解させることが可能である、質量選択ウィンドウを生産するように適合され、前記タンデム質量分析計は、前記質量フィルタを使用して前記MRM遷移の前駆イオンを選択し、前記断片化デバイスを使用して前記前駆イオンを断片化し、前記質量分析器を使用して前記MRM遷移のプロダクトイオンの強度を測定することによって、MRM遷移の強度を測定するように適合され、前記イオンビームは、前記着目化合物をイオン化する、イオン源デバイスによって生産される、ことと、

前記タンデム質量分析計に、前記測定モジュールを使用して、前記イオンビームから、第2の前駆イオンと、同一の第1のプロダクトイオンとを含む、前記着目化合物に関して、第2のMRM遷移の第2の強度を、前記第1のMRM遷移として測定するように命令することであって、前記第2の前駆イオンは、前記第1の前駆イオンの同位体である、ことと、

前記分析モジュールを使用して、前記第1の強度と前記第2の強度の比率を計算することと、

前記分析モジュールを使用して、第1の前駆イオンと前記第2の前駆イオンの数の理論比を、それらの同位体関係に従って計算することと、

前記分析モジュールを使用して、前記比率と前記理論比との間の差異を計算することと、

前記分析モジュールを使用して、前記差異を閾値と比較することと、

前記差異が前記閾値未満である場合、前記分析モジュールを使用して、前記第1のMRM遷移の第1の強度を、前記着目化合物のための干渉を含むものとして識別することとを含む、コンピュータプログラム製品。

【手続補正3】

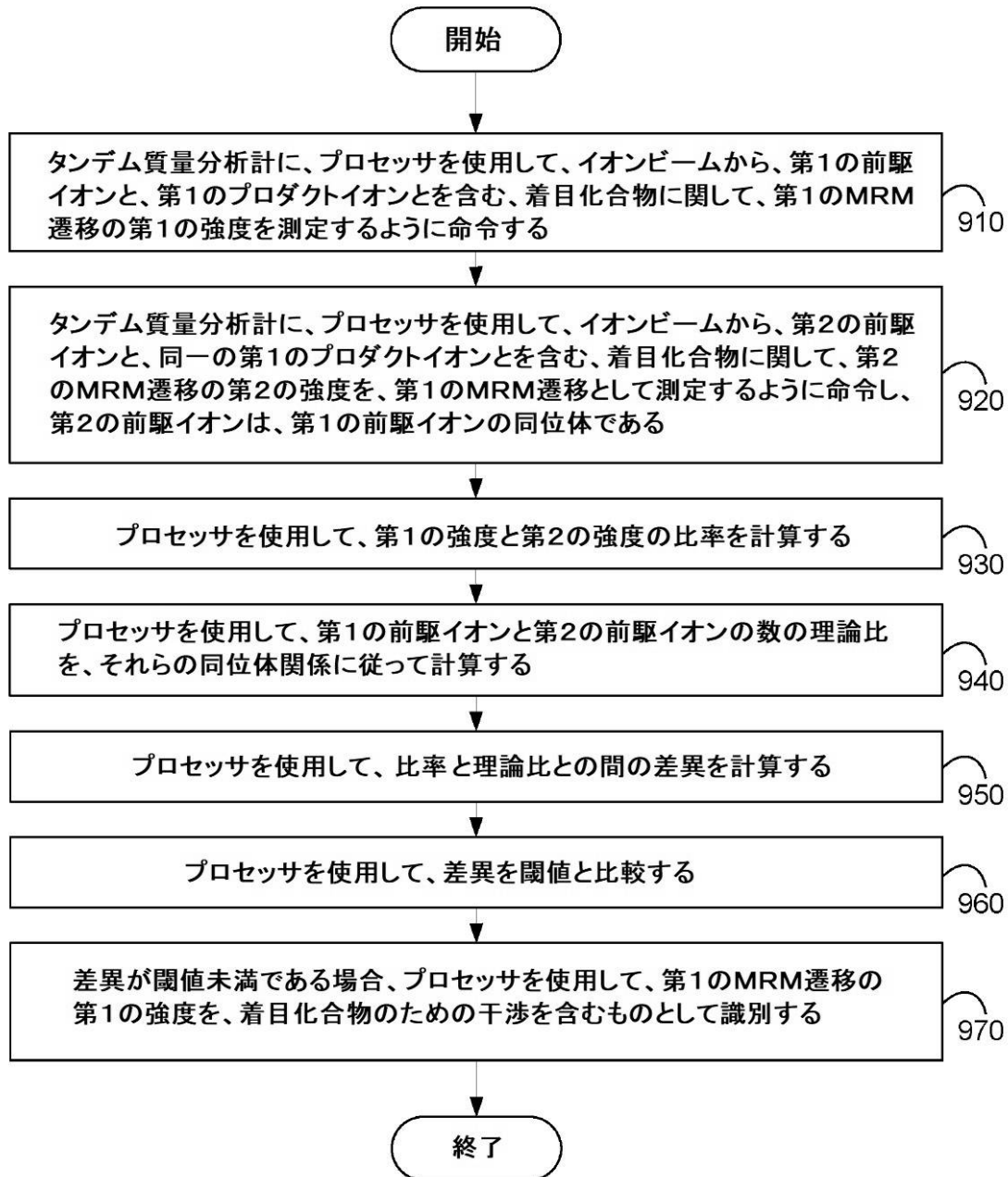
【補正対象書類名】図面

【補正対象項目名】図9

【補正方法】変更

【補正の内容】

【図 9】



900

FIG. 9