

【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27年8月13日(2015.8.13)

【公開番号】特開2014-215043(P2014-215043A)

【公開日】平成26年11月17日(2014.11.17)

【年通号数】公開・登録公報2014-063

【出願番号】特願2013-89399(P2013-89399)

【国際特許分類】

G 0 1 N 27/62 (2006.01)

H 0 1 J 49/26 (2006.01)

【F I】

G 0 1 N 27/62 Y

G 0 1 N 27/62 V

H 0 1 J 49/26

【手続補正書】

【提出日】平成27年6月30日(2015.6.30)

【手続補正1】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 1 0

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 1 0】

また非特許文献1に記載の統計解析では、異なる試料のピーク行列データを統合する際には、上述のTICに基づく強度値の規格化が行われる。上述したように、TIC規格化によって、試料、前処理、測定日、測定条件などが異なることに起因する、試料毎のイオン強度値のばらつきやMALDIイオン源による測定点毎の生成イオン量のばらつき等に起因するばらつきの影響が軽減され、有効な統計解析を行うことができる。

【手続補正2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 8 2

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 8 2】

上述のようにして測定中に圧縮した複数のイメージング質量分析データを比較した統計解析やイメージング画像の表示を行いたい場合には、処理対象のデータを読み込むのに先立って、比較したい複数の試料のイメージング質量分析データをあたかも一つのイメージング質量分析データとして取り扱うことができるよう統合する処理を実行する。この場合、比較対象のデータの各測定点の圧縮マススペクトルを一旦伸張し、上述のイメージング質量分析データの統合処理を行う。

【手続補正3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 8 8

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 8 8】

TICの値は一つのマススペクトルに現れる全てのイオン強度値の和であるため、XICと異なり値は一意に定まる。そのため、測定中のCPUの余剩能力を利用して事前に計算しておいてもよい。その場合、測定中に、データ収集部20で各測定点のマススペクト

ルデータを取得するたびに、所定の質量電荷比範囲に亘るマススペクトルに現れる全てのイオン強度値を加算して T I C を算出し、その値を測定点の位置情報とともに、外部記憶装置 4 に格納しておく。

【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 1 2

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 1 1 2】

即ち、まず、全測定点において  $I_i \times p_i$  の最大値を探索する。いま、a 番目の測定点においてこの値が最大であったとする。このとき、 $I_a \times p_a$  が Max\_long (Max\_short) になるようにリスケーリングすればよいから、各測定点の強度値に、 $Max\_long / (I_a \times p_a)$  又は  $Max\_short / (I_a \times p_a)$  を乗じることでリスケーリングすればよい。上記のリスケーリングに加えて、各測定点の強度値には  $p_i$  を乗じて規格化することになるから、結局、リスケーリングと規格化とを同時に行う場合、各測定点の強度値に  $(Max\_long \times P_a) / (I_a \times P_i)$  又は  $(Max\_short \times P_a) / (I_a \times P_i)$  を乗じればよい。

【手続補正 5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 1 6

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 1 1 6】

まず、上述した例えは図 1 1 に示した処理により、メインメモリ 2 1 の圧縮データ記憶領域 2 1 1 に格納されている圧縮データと規格化係数記憶領域 2 1 3 に格納されている T I C 規格化係数又は X I C 規格化係数とを用いて、全測定領域又は指定された関心領域における規格化された平均マススペクトル又は最大強度マススペクトルを算出する（ステップ S 5 1）。次に、ピーク行列作成部 2 7 はその平均マススペクトル又は最大強度マススペクトルに対しピーク検出を行い、検出されたピークの質量電荷比値を抽出したピークリストを作成する（ステップ S 5 2）。データ伸張処理部 2 4 は、その関心領域内的一つの測定点を選択する（ステップ S 5 3）。規格化演算処理部 3 0 はメインメモリ 2 1 の規格化係数記憶領域 2 1 3 に格納されている該測定点に対応した T I C 規格化係数又は X I C 規格化係数を読み出す（ステップ S 5 4）。

【手続補正 6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 1 8

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 1 1 8】

次に、規格化演算処理部 3 0 はステップ S 5 4 で読み出した T I C 規格化係数又は X I C 規格化係数を、ステップ S 5 7 で復元された強度値に乗じることにより強度値を修正し、これを規格化されたピーク行列の要素として、メインメモリ 2 1 のピーク行列記憶領域 2 1 4 に保存する（ステップ S 5 8）。一つの測定点についてステップ S 5 5 ~ S 5 8 の処理を繰り返し、全ピークについての処理が終了したならば（ステップ S 5 9 で Yes）、関心領域の中で未処理の測定点があるか否かを判定し（ステップ S 6 0）、関心領域の中で未処理の測定点がある場合にはステップ S 6 0 から S 5 3 へと戻って、今度は関心領域内の別の測定点を選択してステップ S 5 4 ~ S 5 9 の処理を繰り返す。これによって、最終的に、規格化されたピーク行列を得ることができるから、これを統計解析に供すればよい。