

【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 20 日 (2015.8.20)

【公開番号】特開 2014-202582 (P2014-202582A)
 【公開日】平成 26 年 10 月 27 日 (2014.10.27)
 【年通号数】公開・登録公報 2014-059
 【出願番号】特願 2013-78428 (P2013-78428)
 【国際特許分類】

G 0 1 N 27/62 (2006.01)

【F I】

G 0 1 N 27/62 D

【手続補正書】

【提出日】平成 27 年 7 月 3 日 (2015.7.3)

【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】請求項 4

【補正方法】変更

【補正の内容】

【請求項 4】

請求項 1 に記載のクロマトグラフ質量分析データ処理装置であって、
 前記マススペクトルスケール処理部は、一つのマススペクトル中のピークの信号強度の対数をとるスケール処理を行うことを特徴とするクロマトグラフ質量分析データ処理装置。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 1 9

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 1 9】

上記第 1 のスケール処理は例えば、そのマススペクトル中の任意のピーク又は任意のデータ点の信号強度値を、該マススペクトル中のピーク（通常は複数のピーク）の信号強度値又は任意のデータ点の標準偏差で除する処理とすることができる。これは、複数のマススペクトル間での信号強度値のばらつきの程度を揃えることを意味する。また、上記第 2 のスケール処理は例えば、そのマススペクトル中の任意のピーク又は任意のデータ点の信号強度値を、そのマススペクトル中のピーク又は任意のデータ点の信号強度値から求まる変動係数（＝標準偏差／平均値）で除する、換言すれば変動係数の逆数を重みとして乗じる処理とすることができる。これは、一つのマススペクトルにおける信号強度値のばらつきに関するマススペクトル間の相対的な差異を反映させることを意味する。

また本発明に係るクロマトグラフ質量分析データ処理装置の別の態様として、上記マススペクトルスケール処理部は、一つのマススペクトル中のピークの信号強度の対数をとるスケール処理を行う構成としてもよい。

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 4 3

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 4 3】

また上記実施例の液体クロマトグラフ質量分析システムでは、(1)式に基づきマススペ

クトルに対し可変スケーリングを行っていたが、別の手法による可変スケーリングを用いることもできる。

具体的には、次の(2)式で示すようなlogスケーリングを用いることができる。

$$TIC_{RT=t} = \sum \log I_{nt_i} \quad \dots (2)$$

ここで、 $\sum$ 、 $TIC_{RT=t}$ 、 I_{nt_i} の定義は(1)式と同じである。即ち、この式では、マススペクトル上の各ピーク信号強度値の対数を求め、保持時間毎に再計算した全信号強度値を用いてRTアライメントを行うことになる。このようなlogスケーリングは、ピークの大小関係を維持し（つまり、どの保持時間のマススペクトルに信号強度が大きなピークがあるかがTICに反映される）つつ信号強度が大きなピークの影響を相対的に抑えるスケーリングであり、それによって、マススペクトル中に他のピークと比べて信号強度が極端に大きなピークが存在した場合でも、該ピークによって信号強度が小さい他のピークの影響が覆い隠されることを回避することができる。

【手続補正4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0060

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0060】

- 1 ... 液体クロマトグラフ部
- 2 ... スポッティング部
- 3 ... 質量分析部
 - 3 1 ... MALDIイオン源
 - 3 2 ... TOF型質量分離部
 - 3 3 ... 検出器
- 4 ... アナログデジタル変換器
- 5 ... データ処理部
 - 5 1 ... 三次元データ格納部
 - 5 2 ... マススペクトルスケーリング計算部
 - 5 3 ... 全信号強度値計算部
 - 5 4 ... 修正TIC作成部
 - 5 5 ... RTアライメント実行部
 - 5 6 ... 差異解析部