

【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28年7月21日(2016.7.21)

【公開番号】特開2015-152350(P2015-152350A)

【公開日】平成27年8月24日(2015.8.24)

【年通号数】公開・登録公報2015-053

【出願番号】特願2014-24525(P2014-24525)

【国際特許分類】

G 0 1 N 27/62 (2006.01)

G 0 1 N 30/72 (2006.01)

G 0 1 N 30/86 (2006.01)

【F I】

G 0 1 N 27/62 Y

G 0 1 N 30/72 A

G 0 1 N 30/72 C

G 0 1 N 30/86 G

G 0 1 N 30/86 D

G 0 1 N 27/62 X

G 0 1 N 27/62 V

【手続補正書】

【提出日】平成28年6月2日(2016.6.2)

【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】

クロマトグラフで時間的に分離された試料中の各成分を質量分析装置により分析するクロマトグラフ質量分析装置で得られたデータを処理するクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置であって、

a) 前記クロマトグラフ質量分析装置を用いた分析により得られた、一つ又は複数の質量におけるイオン強度の時間変化を表した複数のクロマトグラムを取得するクロマトグラム取得手段と、

b) 前記複数のクロマトグラムをその取得時間に応じてグループ化することにより、複数のクロマトグラムグループを作成するグループ化手段と、

c) 前記複数のクロマトグラムを前記クロマトグラムグループ単位で表示画面上に描出するクロマトグラム描出手段と、

を有することを特徴とするクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置。

【請求項 2】

クロマトグラフで時間的に分離された試料中の各成分を質量分析装置により分析するクロマトグラフ質量分析装置で得られたデータを処理するクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置であって、

a) 前記質量分析装置を用いた分析により得られた、前記試料中の各成分についてのマスペクトルを取得するマスペクトル取得手段と、

b) 前記マスペクトルを、複数の化合物に関するマスペクトルパターンを記載した化合物ライブラリに照合することにより、該マスペクトルに対応する化合物を同定する化合物同定手段と、

c) 前記クロマトグラフ質量分析装置による分析により得られた、一つ又は複数の質量におけるイオン強度の時間変化を表した複数のクロマトグラムを取得するクロマトグラム取得手段と、

d) 前記複数のクロマトグラムのうち、前記化合物同定手段で同定された各化合物由来の質量に関する１個又は複数個のクロマトグラムを該化合物に関するクロマトグラムとしてグループ化することにより複数のクロマトグラムグループを作成するグループ化手段と、

e) 前記複数のクロマトグラムを前記クロマトグラムグループ単位で表示画面上に描出するクロマトグラム描出手段と、

を有することを特徴とするクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置。

【請求項３】

更に、

f) 複数の化合物を所定の順序で記載した化合物テーブルを記憶する化合物テーブル記憶手段、

を有し、前記クロマトグラム描出手段が、前記クロマトグラムグループ単位でのクロマトグラムの描出を、前記化合物テーブル上での化合物の記載順に従って行うことを特徴とする請求項２に記載のクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置。

【請求項４】

前記クロマトグラム描出手段が、前記クロマトグラムグループ単位でのクロマトグラムの描出を、該クロマトグラムグループに対応する化合物の保持時間順に従って行うことを特徴とする請求項２に記載のクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置。

【請求項５】

クロマトグラフで時間的に分離された試料中の各成分を質量分析装置により分析するクロマトグラフ質量分析装置で得られたデータを処理するクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置であって、

a) 前記クロマトグラフ質量分析装置を用いた分析により得られた、一つ又は複数の質量におけるイオン強度の時間変化を表した複数のクロマトグラムを取得するクロマトグラム取得手段と、

b) 前記複数のクロマトグラムを複数のグループに分けることにより、複数のクロマトグラムグループを作成するグループ化手段と、

c) 前記グループ化手段で作成する前記複数のクロマトグラムグループの各々に含めるクロマトグラムを、前記複数のクロマトグラムの中からユーザに選択させるユーザ指示受付手段と、

d) 前記複数のクロマトグラムを前記クロマトグラムグループ単位で表示画面上に描出するクロマトグラム描出手段と、

を有することを特徴とするクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置。

【請求項６】

クロマトグラフで時間的に分離された試料中の各成分を質量分析装置により分析するクロマトグラフ質量分析装置で得られたデータを処理するクロマトグラフ質量分析装置用データ処理プログラムであって、コンピュータを、

a) 前記クロマトグラフ質量分析装置を用いた分析により得られた、一つ又は複数の質量におけるイオン強度の時間変化を表した複数のクロマトグラムを取得するクロマトグラム取得手段と、

b) 前記複数のクロマトグラムをその取得時間に応じてグループ化することにより、複数のクロマトグラムグループを作成するグループ化手段と、

c) 前記複数のクロマトグラムを前記クロマトグラムグループ単位で表示画面上に描出するクロマトグラム描出手段、

として機能させることを特徴とするクロマトグラフ質量分析装置用データ処理プログラム。

【請求項７】

クロマトグラフで時間的に分離された試料中の各成分を質量分析装置により分析するク

ロマトグラフ質量分析装置で得られたデータを処理するクロマトグラフ質量分析装置用データ処理プログラムであって、コンピュータを、

a) 前記質量分析装置を用いた分析により得られた、前記試料中の各成分についてのマスペクトルを取得するマスペクトル取得手段と、

b) 前記マスペクトルを、複数の化合物に関するマスペクトルパターンを記載した化合物ライブラリに照合することにより、該マスペクトルに対応する化合物を同定する化合物同定手段と、

c) 前記クロマトグラフ質量分析装置による分析により得られた、一つ又は複数の質量におけるイオン強度の時間変化を表した複数のクロマトグラムを取得するクロマトグラム取得手段と、

d) 前記複数のクロマトグラムのうち、前記化合物同定手段で同定された各化合物由来の質量に関する１個又は複数個のクロマトグラムを該化合物に関するクロマトグラムとしてグループ化することにより複数のクロマトグラムグループを作成するグループ化手段と、

e) 前記複数のクロマトグラムを前記クロマトグラムグループ単位で表示画面上に描出するクロマトグラム描出手段、

として機能させることを特徴とするクロマトグラフ質量分析装置用データ処理プログラム。

【請求項 8】

クロマトグラフで時間的に分離された試料中の各成分を質量分析装置により分析するクロマトグラフ質量分析装置で得られたデータを処理するクロマトグラフ質量分析装置用データ処理プログラムであって、コンピュータを、

a) 前記クロマトグラフ質量分析装置を用いた分析により得られた、一つ又は複数の質量におけるイオン強度の時間変化を表した複数のクロマトグラムを取得するクロマトグラム取得手段と、

b) 前記複数のクロマトグラムを複数のグループに分けることにより、複数のクロマトグラムグループを作成するグループ化手段と、

c) 前記グループ化手段で作成する前記複数のクロマトグラムグループの各々に含めるクロマトグラムを、前記複数のクロマトグラムの中からユーザに選択させるユーザ指示受付手段と、

d) 前記複数のクロマトグラムを前記クロマトグラムグループ単位で表示画面上に描出するクロマトグラム描出手段、

として機能させることを特徴とするクロマトグラフ質量分析装置用データ処理プログラム。

【手続補正 2】

【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】

上記課題を解決するために成された本発明に係るクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置は、クロマトグラフで時間的に分離された試料中の各成分を質量分析装置により分析するクロマトグラフ質量分析装置で得られたデータを処理するクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置であって、

a) 前記クロマトグラフ質量分析装置を用いた分析により得られた、一つ又は複数の質量におけるイオン強度の時間変化を表した複数のクロマトグラムを取得するクロマトグラム取得手段と、

b) 前記複数のクロマトグラムをその取得時間に応じてグループ化することにより、複数のクロマトグラムグループを作成するグループ化手段と、

c) 前記複数のクロマトグラムを前記クロマトグラムグループ単位で表示画面上に描出するクロマトグラム描出手段と、

を有することを特徴としている。

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0017

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0017】

また、本発明に係るクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置は、クロマトグラフで時間的に分離された試料中の各成分を質量分析装置により分析するクロマトグラフ質量分析装置で得られたデータを処理するクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置であって、

a) 前記質量分析装置を用いた分析により得られた、前記試料中の各成分についてのマスペクトルを取得するマスペクトル取得手段と、

b) 前記マスペクトルを、複数の化合物に関するマスペクトルパターンを記載した化合物ライブラリに照合することにより、該マスペクトルに対応する化合物を同定する化合物同定手段と、

c) 前記クロマトグラフ質量分析装置による分析により得られた、一つ又は複数の質量におけるイオン強度の時間変化を表した複数のクロマトグラムを取得するクロマトグラム取得手段と、

d) 前記複数のクロマトグラムのうち、前記化合物同定手段で同定された各化合物由来の質量に関する1個又は複数個のクロマトグラムを該化合物に関するクロマトグラムとしてグループ化することにより複数のクロマトグラムグループを作成するグループ化手段と、

e) 前記複数のクロマトグラムを前記クロマトグラムグループ単位で表示画面上に描出するクロマトグラム描出手段と、

を有することを特徴とするものとしてもよい。

【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0018

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0018】

また、本発明に係るクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置は、クロマトグラフで時間的に分離された試料中の各成分を質量分析装置により分析するクロマトグラフ質量分析装置で得られたデータを処理するクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置であって、

a) 前記クロマトグラフ質量分析装置を用いた分析により得られた、一つ又は複数の質量におけるイオン強度の時間変化を表した複数のクロマトグラムを取得するクロマトグラム取得手段と、

b) 前記複数のクロマトグラムを複数のグループに分けることにより、複数のクロマトグラムグループを作成するグループ化手段と、

c) 前記グループ化手段で作成する前記複数のクロマトグラムグループの各々に含めるクロマトグラムを、前記複数のクロマトグラムの中からユーザに選択させるユーザ指示受付手段と、

d) 前記複数のクロマトグラムを前記クロマトグラムグループ単位で表示画面上に描出するクロマトグラム描出手段と、

を有することを特徴とするものとしてもよい。

【手続補正 5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0036

【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 0 3 6 】

ここで、例えば次のような内容のメソッドファイルを用いて LC / MS 10 による試料分析を行ったとする。

イベント数：1000個、各イベントの測定モード：MRM測定（各イベントには2種類のトランジションを設定）、セグメント数：1000個（各イベントの分析開始時間をずらして設定）。

これにより、一つの測定イベントにつき、前記2種類のトランジションに対応した二つのマスクロマトグラムと、それらのイオン強度を加算したトータルイオンクロマトグラムとが得られるため、このメソッドファイルに従った一連の測定により、合計3000個のクロマトグラムが得られることとなる。いま、このうち301番目のイベントの一つ目のトランジションと、315番目のイベントの二つ目のトランジションのクロマトグラムをユーザが確認したいとする。また、トータルイオンクロマトグラムは全て非表示とする。この場合、図3の設定画面にて以下のような設定を行う。

グループ数：1、グループ毎のクロマトグラム数：30、「全セグメントを同一設定とする」のチェックボックス63にチェックを入れ、「なし」のラジオボタン65を選択。

これにより、上記二つのクロマトグラムが同一のクロマトグラムグループに振り分けられ、図4に示すように、モニタ24の画面上に同時に表示される。なお、同図は、前記設定に基づいて作成された67個のクロマトグラムグループのうち、21番目のクロマトグラムグループを表示した状態を示しており、前記301番目のイベントの一つ目のトランジションのクロマトグラムが画面の一番上に表示され、上記315番目のイベントの二つ目のトランジションのクロマトグラムが画面の一番下に表示されている。

【手続補正6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0044

【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 0 4 4 】

以上、本発明を実施するための形態について説明を行ったが、本発明は上記実施形態に限定されるものではなく、本発明の趣旨の範囲で適宜変更が許容される。例えば、上記実施例では本発明に係るクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置を LC / MS 用のデータ処理装置として用いる場合を例に挙げて説明したが、本発明に係るクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置は GC / MS 用のデータ処理装置とすることもできる。また、上記実施形態では、スペクトル作成部41及びクロマトグラム作成部42をそれぞれ本発明におけるマススペクトル取得手段及びクロマトグラム取得手段に相当するものとしたが、本発明におけるマススペクトル取得手段及びクロマトグラム取得手段は、本発明に係るクロマトグラフ質量分析装置用データ処理装置とは別体に構成されたコンピュータにより作成されたマススペクトル及びクロマトグラムをネットワーク等を介して取得するものとしてもよい。