

【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 2 年 5 月 14 日 (2020.5.14)

【公表番号】特表 2019-521329 (P2019-521329A)  
 【公表日】令和 1 年 7 月 25 日 (2019.7.25)  
 【年通号数】公開・登録公報 2019-030  
 【出願番号】特願 2018-561256 (P2018-561256)  
 【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 D

H 0 1 J 49/26

【手続補正書】  
 【提出日】令和 2 年 4 月 2 日 (2020.4.2)  
 【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】

多価種の内の多原子親分子の質量を同定するために低分解能質量電荷比スペクトルから質量情報を抽出する方法であって、

多価イオンの集団を示すデータセットを質量分析計から受信するステップであって、各イオン上の電荷の数はそのイオンの荷電状態を規定し、前記イオンの集団内のイオンのサブ集団は同じ電荷状態を有する前記イオンの集団のイオンを含む、該ステップと、

前記イオンの荷電状態を規定するデータセットを使用して入力質量電荷比スペクトルを生成するステップであって、前記各荷電状態のサブ集団は前記質量電荷比スペクトルにおける強度によって表される、該ステップと、

前記入力質量電荷比スペクトルを処理して信号増強化質量電荷比スペクトル (103) を提供するステップであって、前記信号増強化質量電荷比スペクトルは前記質量電荷比スペクトルおよび前記質量電荷比スペクトルの平滑化された表現の商の対数から生成される、該ステップと、

前記多原子親分子の質量をその中で探索するための規定された荷電質量スペクトルの規定された荷電質量値の範囲を同定する (104) ステップと、

前記規定された荷電質量値の範囲内の各質量に対し、最大荷電状態までの連続した荷電状態で前記質量に対応する前記信号増強化質量電荷比スペクトルにおける値の加算に等しい総和を関数

【数 1】

$$F(M) = \sum_{n=1}^{n=n_{max}} X \left( \frac{M - zm_a}{n} + m_a \right)$$

を使用して生成するステップであって、ここで、M は規定された荷電質量値の前記範囲内の任意の規定された質量であり、 $m_a$  は電荷輸送付加物の質量であり、z は規定された荷

電質量スペクトルの次数であり、 $X$  は信号増強化質量電荷比スペクトルの分布関数である、該ステップと、

前記総和の値を用いて前記多原子親分子の質量を決定するステップと  
を含むことを特徴とする方法。

【請求項 2】

前記総和の値を使用して多原子親分子の質量を決定するステップは、前記多原子親分子の前記質量を決定するために、前記総和の範囲にわたって前記総和からの値を正規化するステップを含むことを特徴とする請求項 1 に記載の方法。

【請求項 3】

前記電荷輸送付加物の質量、 $m_a$ 、は、プロトン質量を表す 1 に等しくなるように設定されることを特徴とする請求項 1 または 2 に記載の方法。

【請求項 4】

前記信号増強化質量電荷比スペクトル ( 1 0 3 ) は関数

【数 2】

$$X_j = \ln \left( \frac{I_j}{S_j} \right)$$

から生成され、

ここで、 $X$  は前記信号増強化質量電荷比スペクトルを表し、 $I$  は入力質量電荷比スペクトル ( 2 0 1 ) 内の強度に対応し、 $S$  は前記入力質量電荷比スペクトルの平滑化された表現であることを特徴とする請求項 1 ないし 3 のいずれか 1 つに記載の方法。

【請求項 5】

前記規定された荷電質量値の前記規定された範囲内の各質量について、前記方法は、最大荷電状態の異なる値までの合計を計算するステップと、

前記最大荷電状態の異なる値までの前記合計からの前記値を使用して前記多原子親分子の分子量を決定するステップと

をさらに含むことを特徴とする請求項 1 ないし 4 のいずれか 1 つに記載の方法。

【請求項 6】

前記信号増強化質量電荷比スペクトルを形成する前に、前記入力質量電荷比スペクトルのスペクトル前処理をさらに含むことを特徴とする請求項 1 ないし 5 のいずれか 1 つに記載の方法。

【請求項 7】

前記スペクトル前処理が、平滑化および / またはベースライン減算のうちの少なくとも 1 つから選択されることを特徴とする請求項 6 に記載の方法。

【請求項 8】

前記多価種がエレクトロスプレイイオン化によって生成されることを特徴とする請求項 1 ないし 7 のいずれか 1 つに記載の方法。

【請求項 9】

前記入力質量電荷比スペクトルを生成するために、質量分析計源内で多原子親分子をイオン化するステップを含むことを特徴とする請求項 1 ないし 8 のいずれか 1 つに記載の方法。

【請求項 10】

前記規定された電荷対質量スペクトルは、全ての同定された種がゼロ荷電値を有するゼロ荷電質量スペクトルであることを特徴とする請求項 1 ないし 9 のいずれか 1 つに記載の方法。

【請求項 11】

前記規定された荷電質量スペクトルが、一価質量値の範囲を同定するために使用される一価質量スペクトルであることを特徴とする請求項 1 ないし 9 のいずれか 1 つに記載の方法。

**【請求項 1 2】**

エレクトロスプレイイオン化ソースおよび検出器を備える質量分析器であって、前記検出器は前記イオン化ソースによって生成された多価イオンの集団を示す出力を生成するように構成され、各イオン上の電荷数はそのイオンの荷電状態を規定し、各荷電状態は前記イオンの前記集団内のイオンのサブ集団からなり、前記質量分析器は請求項 1 ないし 1 1 のいずれか 1 つに記載の方法を実施するように構成されたプロセッサをさらに備えたことを特徴とする質量分析器。