

【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29年1月19日(2017.1.19)

【公開番号】特開2015-166726(P2015-166726A)
 【公開日】平成27年9月24日(2015.9.24)
 【年通号数】公開・登録公報2015-059
 【出願番号】特願2014-41743(P2014-41743)
 【国際特許分類】

G 0 1 N 30/86 (2006.01)

【F I】

G 0 1 N 30/86 G

G 0 1 N 30/86 D

【手続補正書】

【提出日】平成28年12月2日(2016.12.2)

【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】

複数回の分析について、複数の制御パラメータの値の組み合わせから成る分析条件及び各分析の実行順序を記述したスケジュールテーブルに従って試料の分析を行うクロマトグラフに用いられるデータ処理装置であって、

a) 一の試料に対して分析が終了した複数の分析条件を記憶する記憶部と、

b) 前記複数の分析条件について、それぞれの分析条件に含まれる制御パラメータの値の全ての組み合わせを作成し、該組み合わせの中から、前記記憶部に記憶された複数の分析条件に含まれていない分析条件について、前記制御パラメータを項目として列挙したリストを作成する未検討分析条件作成部と、

c) 前記リストを表示する表示部と、

を備えることを特徴とするクロマトグラフ用データ処理装置。

【請求項2】

前記未検討分析条件作成部が、さらに、前記分析が終了した複数の分析条件の各々について得られたクロマトグラムを取得し、ユーザの指示があった場合に、前記クロマトグラムの一つ又は複数を前記表示部に表示させることを特徴とする請求項1に記載のクロマトグラフ用データ処理装置。

【請求項3】

さらに、ユーザの指示があった場合に、前記リストに記載された分析条件に対応するメソッドファイルを作成するメソッドファイル作成部を備えることを特徴とする請求項1又は2に記載のクロマトグラフ用データ処理装置。

【請求項4】

複数回の分析について、複数の制御パラメータの値の組み合わせから成る分析条件及び各分析の実行順序を記述したスケジュールテーブルに従って試料の分析を行うクロマトグラフに用いられるデータ処理方法であって、

a) 一の試料に対して分析が終了した複数の分析条件を記憶するステップと、

b) 前記複数の分析条件について、それぞれの分析条件に含まれる制御パラメータの値の全ての組み合わせを作成し、該組み合わせの中から、前記複数の分析条件に含まれていない分析条件について、前記制御パラメータを項目として列挙したリストを作成するステ

ップと、

c) 前記リストを表示するステップと、
を有することを特徴とするクロマトグラフ用データ処理方法。

【請求項 5】

さらに、

前記分析が終了した複数の分析条件の各々について得られたクロマトグラムを取得し、ユーザの指示があった場合に、前記クロマトグラムの一つ又は複数を表示するステップを有することを特徴とする請求項 4 に記載のクロマトグラフ用データ処理方法。

【請求項 6】

さらに、

ユーザの指示があった場合に、前記リストに記載された分析条件に対応するメソッドファイルを作成するステップ

を有することを特徴とする請求項 4 又は 5 に記載のクロマトグラフ用データ処理方法。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0010

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0010】

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用データ処理装置は、複数回の分析について、複数の制御パラメータの値の組み合わせから成る分析条件及び各分析の実行順序を記述したスケジュールテーブルに従って試料の分析を行うクロマトグラフに用いられるデータ処理装置であって、

a) 一の試料に対して分析が終了した複数の分析条件を記憶する記憶部と、

b) 前記複数の分析条件について、それぞれの分析条件に含まれる制御パラメータの値の全ての組み合わせを作成し、該組み合わせの中から、前記記憶部に記憶された複数の分析条件に含まれていない分析条件について、前記制御パラメータを項目として列挙したリストを作成する未検討分析条件作成部と、

c) 前記リストを表示する表示部と、
を備えることを特徴とする。

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0011

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0011】

また、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用データ処理方法は、

複数回の分析について、複数の制御パラメータの値の組み合わせから成る分析条件及び各分析の実行順序を記述したスケジュールテーブルに従って試料の分析を行うクロマトグラフに用いられるデータ処理方法であって、

a) 一の試料に対して分析が終了した複数の分析条件を記憶するステップと、

b) 前記複数の分析条件について、それぞれの分析条件に含まれる制御パラメータの値の全ての組み合わせを作成し、該組み合わせの中から、前記複数の分析条件に含まれていない分析条件について、前記制御パラメータを項目として列挙したリストを作成するステップと、

c) 前記リストを表示するステップと、
を有することを特徴とする。

【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】 0 0 1 2

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【 0 0 1 2 】

前記未検討分析条件作成部が、さらに、前記分析が終了した複数の分析条件の各々について得られたクロマトグラムを取得し、ユーザの指示があった場合に、前記クロマトグラムの一つ又は複数を前記表示部に表示させる構成としてもよい。

【手続補正 5】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 1 8

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【 0 0 1 8 】

本実施例の液体クロマトグラフ 1 0 0 は、送液部 1 0、オートサンプラ 2 0、カラムオープン 3 0、検出部 4 0、システムコントローラ 5 0、制御装置 7 0 を備え、制御装置 7 0 には、キーボードやマウスから成る操作部 7 1 及びディスプレイから成る表示部 7 2 が接続されている。制御装置 7 0 は、本発明のクロマトグラフ用データ処理装置に相当する。制御装置 7 0 は、従来の液体クロマトグラフ 1 の制御装置 6 0 と同様に、記憶部 6 1、分析条件設定部 6 2、スケジュールテーブル作成部 6 3、分析制御部 6 4、及びデータ処理部 6 5 を有することに加え、未検討分析条件作成部 6 6 及びメソッドファイル作成部 6 7 を有し、コンピュータで具現化される。

【手続補正 6】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 2 2

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【 0 0 2 2 】

ユーザが操作部 7 1 を操作し、メソッドファイル「ファイル 1」～「ファイル 3」に記述された分析条件とは別の分析条件を検討することを制御装置 7 0 に指示すると、制御装置 7 0 内の未検討分析条件作成部 6 6 は、「ファイル 1」～「ファイル 3」を記憶部 6 1 から読み出し、それぞれのメソッドファイルに記述された制御パラメータを抽出する。そして、未検討分析条件作成部 6 6 は、「ファイル 1」～「ファイル 3」に記述された分析条件について、抽出された制御パラメータを項目として列挙した分析履歴リストを作成する。

【手続補正 7】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0 0 2 4

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【 0 0 2 4 】

これらメソッドファイルに記述された分析条件の間では、「移動相の流量」、「移動相の種類」、「カラムオープンの温度」、及び「使用するカラムの種類」の 4 つの値に違いがあるため、未検討分析条件作成部 6 6 はこれら 4 つの制御パラメータを抽出する。未検討分析条件作成部 6 6 は、これらメソッドファイルに記述された分析条件について、抽出された 4 つの制御パラメータを項目として列挙した分析履歴リストを作成し、表示部 7 2 の画面上に、例えば図 2 の A のように表示させる。なお、図 2 の分析履歴リスト中において「Pump A」、「Pump B」で示された列は、それぞれ送液ポンプ P_A、P_B により吸引される溶媒の種類を表している。また、「Pump A」の列における「A」は溶媒容器 1 1 a 中の溶媒を意味し、「Pump B」の列における「A」は溶媒容器 1 2 a 中の溶媒を、同じ列の「B」は溶媒容器 1 2 b 中の溶媒を意味している。なお、上述の移動相の種類とは、送

液ポンプ P_A で吸引した溶媒容器 1 1 a 中の溶媒と、送液ポンプ P_B で吸引した溶媒容器 1 2 a 中の溶媒を混合して成る移動相を意味し、移動相の種類とは、送液ポンプ P_A で吸引した溶媒容器 1 1 a 中の溶媒と送液ポンプ P_B で吸引した溶媒容器 1 2 b 中の溶媒を混合して成る移動相を意味している。

【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 2 5

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 2 5】

その後、ユーザが操作部 7 1 を操作することにより、図 2 の「Pattern Check」と表示された操作ボタン 3 0 2 がクリックされると、未検討分析条件作成部 6 6 は上記で抽出した制御パラメータの値の全ての組み合わせを作成し、該組み合わせの中から「ファイル 1」～「ファイル 3」に記述されているものと同一の組み合わせ以外の組み合わせを未検討分析条件として抽出する。そして、この未検討分析条件について、前記制御パラメータを項目として列挙した未検討分析条件リストを作成する。

【手続補正 9】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 2 6

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 2 6】

上記の例では、抽出された 4 つの制御パラメータの値は、移動相の流量について 2 通り (1 mL と 2 mL)、移動相の種類について 2 通り (と)、カラムオープンの温度について 2 通り (4 0 と 4 5)、使用するカラムについて 2 通り (3 と 4) であるため、未検討分析条件作成部 6 6 は、制御パラメータの値の全ての組み合わせとして $2 \times 2 \times 2 \times 2 = 16$ 通りの組み合わせを作成する。更に未検討分析条件作成部 6 6 は、これら 16 通りの組み合わせの中からすでに終了した分析についてのメソッドファイル (ファイル 1 ~ 3) に記述された 3 通りの組み合わせを除外した 13 通りの組み合わせを未検討分析条件として抽出する。そして、これら 13 通りの未検討分析条件について、「移動相の流量」、「移動相の種類」、「カラムオープンの温度」、及び「使用するカラムの種類」を項目として列挙した未検討分析条件リストを作成し、表示部 7 2 の画面上に例えば図 2 の B のように表示させる。

【手続補正 10】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 2 8

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 2 8】

さらに、ユーザが操作部 7 1 を用いて、表示部 7 2 に表示された分析履歴リスト (図 2 の A) 中に設けられたチェックボックスの一つ又は複数にチェックを入れ、図 2 中の「Draw」と表示された操作ボタン 3 0 1 をクリックすると、未検討分析条件作成部 6 6 はチェックの入った行に対応する分析について得られたクロマトグラムを記憶部 6 1 から取得し、分析履歴リストと並べて表示部 7 2 (図 2 中の C の領域) に表示させる。

【手続補正 11】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 2 9

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 2 9】

未検討分析条件作成部 6 6 がこれらの機能を有することで、ユーザは既に分析に用いられた制御パラメータを分析履歴リストで、また、指定した分析条件に対応する分析結果をクロマトグラムでそれぞれ確認することができるため、メソッドスカウティングにおいてさらに検討すべき別の分析条件の立案に参考となる情報を容易に得ることができる。

【手続補正 1 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 0 3 2

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0 0 3 2】

- 1、1 0 0 ... 液体クロマトグラフ
- 1 0 ... 送液部
- 1 1 a ~ 1 1 d、1 2 a ~ 1 2 d ... 溶媒容器
- 1 3、1 4 ... 脱気ユニット
- 1 5、1 6 ... 溶媒切替バルブ
- 1 7 ... グラジエントミキサー
- 2 0 ... オートサンプラ
- 3 0 ... カラムオープン
- 3 1、3 3 ... 流路切替部
- 3 2 a ~ 3 2 f ... カラム
- 4 0 ... 検出部
- 4 1 ... 検出器
- 5 0 ... システムコントローラ
- 6 0、7 0 ... 制御装置
- 6 1 ... 記憶部
- 6 2 ... 分析条件設定部
- 6 3 ... スケジュールテーブル作成部
- 6 4 ... 分析制御部
- 6 5 ... データ処理部
- 6 6 ... 未検討分析条件作成部
- 6 7 ... メソッドファイル作成部
- 7 1 ... 操作部
- 7 2 ... 表示部
- 3 0 1、3 0 2、3 0 3 ... 操作ボタン

【手続補正 1 3】

【補正対象書類名】図面

【補正対象項目名】図 1

【補正方法】変更

【補正の内容】

【図1】

