

【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1年7月4日(2019.7.4)

【公表番号】特表2018-517905(P2018-517905A)

【公表日】平成30年7月5日(2018.7.5)

【年通号数】公開・登録公報2018-025

【出願番号】特願2017-561835(P2017-561835)

【国際特許分類】

G 01 N 27/62 (2006.01)

G 01 N 30/72 (2006.01)

【F I】

G 01 N 27/62 D

G 01 N 30/72 A

G 01 N 30/72 C

【手続補正書】

【提出日】令和1年5月30日(2019.5.30)

【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】

質量スペクトルデータを処理する方法であって、

サンプルを使用して実験を行うステップであって、前記実験が質量分析計を使用して質量分析を行うことを含む、ステップと、

前記実験を行った結果として、プリカーサーイオンデータ及びフラグメントイオンデータを獲得するステップと、

前記プリカーサーイオンデータに含まれる1つ又は2つ以上のプリカーサー電荷クラスタを決定するステップと、

前記プリカーサー電荷クラスタのうち第1のものに対してピーク検出を行うステップであって、前記第1のプリカーサー電荷クラスタが複数のスキャンにわたって追跡されて、前記第1のプリカーサー電荷クラスタの検出ピークを形成する、ステップと、

検証基準にしたがって、前記第1のプリカーサー電荷クラスタと関連付けられた前記フラグメントイオンデータにおいて同定される、フラグメントイオンの第1のセットを決定するステップと、

を含む、方法。

【請求項2】

前記検証基準を使用して、フラグメントイオンの最初のセットをフィルタ処理又は改良し、フラグメントイオンの改訂されたセットを決定するステップを含む、請求項1に記載の方法。

【請求項3】

前記質量分析計が、主にプリカーサーイオンを生成する低エネルギーモードと、主に前記プリカーサーイオンのフラグメントイオンを生成する上昇エネルギーモードとの間で切り替わり、前記切替えが、前記低エネルギーモード及び前記上昇エネルギーモードの適用を十分な頻度で交互に行うプロトコルにしたがうものであり、それにより、前記低エネルギーモード及び前記上昇エネルギーモードのそれぞれが、クロマトグラフィピー幅の間に複数回適用され、前記プリカーサーイオンデータが前記低エネルギーモードのときに獲

得される質量スペクトルデータであり、前記フラグメントイオンデータが前記上昇エネルギー モードのときに獲得される質量スペクトルデータである、請求項1に記載の方法。

【請求項4】

前記プリカーサー電荷クラスタのそれぞれが、単一の電荷状態でプリカーサーイオンを同定する、請求項1に記載の方法。

【請求項5】

前記検証基準が、前記第1のプリカーサー電荷クラスタ、及び前記フラグメントイオンの第1のセットのフラグメントイオンのいずれかにおける1つ又は2つ以上の強度比を含む、請求項1に記載の方法。

【請求項6】

頂点スキャンが、前記第1のプリカーサー電荷クラスタの前記強度が前記複数のスキャンにおいて最大値であるスキャンであり、検証基準にしたがって、前記第1のプリカーサー電荷クラスタと関連付けられた前記フラグメントイオンデータにおいて同定される、フラグメントイオンの第1のセットを決定する前記ステップが、

前記複数のスキャンのうち第1のものにおける前記第1のプリカーサー電荷クラスタと前記頂点スキャンとの第1の強度比を決定するステップと、

前記第1のスキャンにおける前記第1のセットの第1のフラグメントイオンと前記頂点スキャンとの第2の強度比を決定するステップと、

前記第1の強度比及び前記第2の強度比がほぼ同じであると判断するステップと、を含む、請求項5に記載の方法。

【請求項7】

前記プリカーサーイオンデータおよびフラグメントイオンデータは、前記複数のスキャンにわたって複数の質量分離ウィンドウから獲得される、請求項1に記載の方法。

【請求項8】

装置であって、

プロセッサと、

実行されると質量スペクトルデータを処理する方法を行うコードが格納された、メモリと、を備え、前記方法が、

サンプルを使用して実験を行うステップであって、前記実験が質量分析計を使用して質量分析を行うことを含む、ステップと、

前記実験を行った結果として、プリカーサーイオンデータ及びフラグメントイオンデータを獲得するステップと、

前記プリカーサーイオンデータに含まれる1つ又は2つ以上のプリカーサー電荷クラスタを決定するステップと、

前記プリカーサー電荷クラスタのうち第1のものに対してピーク検出を行うステップであって、前記第1のプリカーサー電荷クラスタが複数のスキャンにわたって追跡されて、前記第1のプリカーサー電荷クラスタの検出ピークを形成する、ステップと、

検証基準にしたがって、前記第1のプリカーサー電荷クラスタと関連付けられた前記フラグメントイオンデータにおいて同定される、フラグメントイオンの第1のセットを決定するステップと、

を含む、装置。

【請求項9】

前記検証基準を使用して、フラグメントイオンの最初のセットをフィルタ処理又は改良し、フラグメントイオンの改訂されたセットを決定するステップを含む、請求項8に記載の装置。

【請求項10】

前記質量分析計が、主にプリカーサーイオンを生成する低エネルギー モードと、主に前記プリカーサーイオンのフラグメントイオンを生成する上昇エネルギー モードとの間で切り替わり、前記切替えが、前記低エネルギー モード及び前記上昇エネルギー モードの適用を十分な頻度で交互に行うプロトコルにしたがうものであり、それにより、前記低エネル

ギー モード 及び 前記 上昇エネルギー モード の それ ぞれ が、クロマトグラフィ ピーク 幅 の 間に 複数 回 適用 され、前記 プリカーサー イオン データ が 前記 低エネルギー モード の とき に 獲得 さ れる 質量スペクトル データ で あり、前記 フラグメント イオン データ が 前記 上昇エネルギー モード の とき に 獲得 さ れる 質量スペクトル データ で ある、請求項 8 に 記載 の 装置。

【請求項 11】

前記 プリカーサー 電荷 クラスタ の それ ぞれ が、単一 の 電荷 状態 で プリカーサー イオン を 同定 す る、請求項 8 に 記載 の 装置。

【請求項 12】

前記 検証 基準 が、前記 第 1 の プリカーサー 電荷 クラスタ、及び 前記 フラグメント イオン の 第 1 の セット の フラグメント イオン の い ずれか に お け る 1 つ 又は 2 つ 以 上 の 強度 比 を 含む、請求項 8 に 記載 の 装置。

【請求項 13】

頂点スキャン が、前記 第 1 の プリカーサー 電荷 クラスタ の 前記 強度 が 前記 複数 の スキヤン に お いて 最大 値 で ある スキヤン で あり、検証 基準 に し た が って、前記 第 1 の プリカーサー 電荷 クラスタ と 関連 付 け られた 前記 フラグメント イオン データ に お いて 同定 さ れる、フラグメント イオン の 第 1 の セット を 決定 す る 前記 ステップ が、

前記 複数 の スキヤン の うち 第 1 の もの に お け る 前記 第 1 の プリカーサー 電荷 クラスタ と 前記 頂点スキャン と の 第 1 の 強度 比 を 決定 す る ステップ と、

前記 第 1 の スキヤン に お け る 前記 第 1 の セット の 第 1 の フラグメント イオン と 前記 頂点スキャン と の 第 2 の 強度 比 を 決定 す る ステップ と、

前記 第 1 の 強度 比 及び 前記 第 2 の 強度 比 が ほ ぼ 同じ で ある と 判断 す る ステップ と、を 含む、請求項 8 に 記載 の 装置。

【請求項 14】

前記 プリカーサー イオン データ お よび フラグメント イオン データ は、前記 複数 の スキヤン に わた って 複数 の 質量 分離 ウィンドウ から 獲得 さ れる、請求項 8 に 記載 の 装置。

【請求項 15】

質量スペクトル データ を 处理 す る 方 法 で あ って、サンプル を 使用 す る こ と で 実験 を 行 う ステップ で あ って、前記 実験 が 質量分析計 を 使用 す る こ と で 質量分析 を 行 う こ と を 含み、前記 質量分析計 が 複数 の スキヤン の ため の スケジュール に し た が って 動作 す る、ステップ と、

スキャン 中 に、質量分離 ウィンドウ 内 の プリカーサー イオン データ を 獲得 す る ステップ と、

前記 プリカーサー イオン データ を 使用 す る こ と で 1 つ 又は 2 つ 以 上 の プリカーサー 電荷 クラスタ を 決定 す る ステップ と、

前記 プリカーサー イオン データ を 使用 す る こ と で 後続 の スキヤン の ため に 前記 質量分離 ウィンドウ を 調整 す る ステップ と、

前記 プリカーサー 電荷 クラスタ の 部分 を 連鎖 せ ざ る こ と によ つて、前記 第 1 の プリカーサー イオン の ピーク プロファイル を 決定 す る ステップ と、

を 含む、方法。

【請求項 16】

前記 獲得 す る ステップ は、上昇エネルギー スキヤン で 異なる 質量分離 ウィンドウ を 反復 して 使用 す る ステップ を 含む、請求項 15 に 記載 の 方法。

【請求項 17】

m/z 及び 保持 時間 を 含む 複数 の 次元 を 有する 有界 領域 を 決定 す る ステップ と、前記 有界 領域 に 対して フラグメンテーション が 行わ れる ま で、上昇エネルギー スキヤン で 異なる 質量分離 ウィンドウ を 反復 して 使用 す る ステップ と、

を 含む、請求項 15 に 記載 の 方法。

【請求項 18】

前記 質量分析計 が、主 に プリカーサー イオン を 生成 す る 低エネルギー モード と、主 に 前記 プリカーサー イオン の フラグメント イオン を 生成 す る 上昇エネルギー モード との 間 で 切

り替わり、前記切替えが、前記低エネルギー モード及び前記上昇エネルギー モードの適用を十分な頻度で交互に行うプロトコルにしたがうものであり、それにより、前記低エネルギー モード及び前記上昇エネルギー モードのそれぞれが、クロマトグラフィピーク幅の間に複数回適用され、前記プリカーサーイオンデータが前記低エネルギー モードのときに獲得される質量スペクトルデータであり、前記フラグメントイオンデータが前記上昇エネルギー モードのときに獲得される質量スペクトルデータである、請求項 15 に記載の方法。

【請求項 19】

前記プリカーサー電荷クラスタのそれぞれが、単一の電荷状態でプリカーサーイオンを同定する、請求項 15 に記載の方法。

【請求項 20】

前記質量分離ウィンドウの少なくとも第 1 の部分が、フラグメンテーションに対してほぼ同じ数のプリカーサーイオンを選択することにしたがって決定されたサイズ及び関連 m/z 範囲を有する、請求項 15 に記載の方法。