

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2024年7月11日(11.07.2024)



(10) 国際公開番号
WO 2024/147191 A1

(51) 国際特許分類:
G01N 27/62 (2021.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2023/000135

(22) 国際出願日: 2023年1月6日(06.01.2023)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(71) 出願人: 株式会社島津製作所 (SHIMADZU CORPORATION) [JP/JP]; 〒6048511 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地 Kyoto (JP).

(72) 発明者: 川満 春菜 (KAWAMITSU Haruna); 〒6048511 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式会社島津製作所内 Kyoto (JP). 河

村 和広 (KAWAMURA Kazuhiro); 〒6048511 京都府京都市中京区西ノ京桑原町1番地 株式会社島津製作所内 Kyoto (JP).

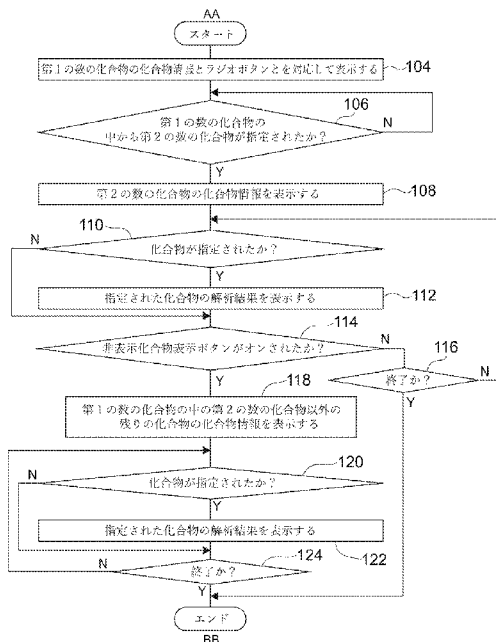
(74) 代理人: 駒井 慎二 (KOMAI Shinji); 〒1010061 東京都千代田区神田三崎町2-6-7 田中衡機ビル3階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MY,

(54) Title: ANALYSIS RESULT DISPLAY PROCESSING APPARATUS, ANALYSIS RESULT DISPLAY PROCESSING METHOD, AND ANALYSIS RESULT DISPLAY PROCESSING PROGRAM

(54) 発明の名称: 解析結果表示処理装置、解析結果表示処理方法、及び解析結果表示処理プログラム

[図7]



AA... START
104... DISPLAY COMPOUND INFORMATION ON FIRST NUMBER OF COMPOUNDS AND RADIO BUTTON IN CORRESPONDENCE WITH EACH OTHER
106... HAVE SECOND NUMBER OF COMPOUNDS BEEN DESIGNATED FROM FIRST NUMBER OF COMPOUNDS?
108... DISPLAY COMPOUND INFORMATION ON SECOND NUMBER OF COMPOUNDS
110... HAVE COMPOUNDS BEEN DESIGNATED?
112... DISPLAY ANALYSIS RESULT OF DESIGNATED COMPOUND
114... HAS HIDDEN COMPOUND DISPLAY BUTTON BEEN TURNED ON?
116... COMPLETED?
118... DISPLAY COMPOUND INFORMATION ON REMAINING COMPOUNDS OTHER THAN SECOND NUMBER OF COMPOUNDS AMONG FIRST NUMBER OF COMPOUNDS
BB... END

(57) Abstract: This analysis result display processing apparatus comprises: a storage device for storing a result of analysis, the analysis being conducted using a chromatogram and a first number of analysis methods, wherein the chromatogram is obtained by executing analysis on a sample using an apparatus in which chromatograph and a mass spectroscope are combined, the first number of analysis methods are methods for confirming the presence or absence of a first number of compounds in the sample, and the result of analysis relates to presence or absence of the first number of compounds in

[続葉有]

MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL,
PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK,
SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA,
UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

the sample; a reception processing unit for receiving a designation of a second number of compounds selected from the first number of compounds, wherein the second number is smaller than the first number; and a display processing unit for performing processing so that a result of analysis relating to the presence or absence of the second number of compounds and extracted from the result of analysis relating to the presence or absence of the first number of compounds stored in the storage device is displayed on a display device.

(57) 要約: 解析結果表示処理装置は、試料に対してクロマトグラフと質量分析装置とを組み合わせた装置を用いて分析を実行して得られたクロマトグラムと、前記試料における第1の数の化合物の有無を確認するための第1の数の分析メソッドとを用いて行った、前記試料における前記第1の数の化合物の有無の解析結果を記憶する記憶装置と、前記第1の数の化合物の中から選択された前記第1の数より小さい第2の数の化合物の指定を受け付ける受付処理部と、前記記憶装置に記憶された前記第1の数の化合物の有無の解析結果の中から抽出した、前記第2の数の化合物の有無の解析結果が表示装置に表示されるように処理する表示処理部と、を備える。

明 細 書

発明の名称：

解析結果表示処理装置、解析結果表示処理方法、及び解析結果表示処理プログラム

技術分野

[0001] 本開示の技術は、解析結果表示処理装置、解析結果表示処理方法、及び解析結果表示処理プログラムに関する。

背景技術

[0002] 近年、食品中の残留農薬検査又は環境水中の汚染物質検査、或いは生物試料中のメタボロミクス解析など様々な分野において、ガスクロマトグラフ質量分析装置（Gas Chromatography－Mass spectrometry；GC－MS）又は液体クロマトグラフ質量分析装置（Liquid Chromatography－Mass spectrometry；LC－MS）などのクロマトグラフ質量分析装置が広く使用されている。以下、主としてガスクロマトグラフ質量分析装置を例に挙げて説明するが、液体クロマトグラフ質量分析装置又は超臨界流体クロマトグラフ質量分析装置（SFC－MS）等でも事情が同じであることは後述の説明から明らかである。

[0003] ガスクロマトグラフ質量分析装置を用いて試料中の未知化合物を同定する際には、一般に、トータルイオンカレントクロマトグラム（Total Ion Current Chromatogram；TICC）において検出されたピークのピークトップ付近の保持時間における実測のマススペクトルと、マススペクトルライブラリーに収録されている標準的なマススペクトルとのパターンを比較し、その類似度が所定の閾値以上であること又は高い値を示すことを判定することによって化合物を同定する（国際公開第2018／138901号参照）。この手法は、分析対象である化合物を事前に指定しないことから、ノンターゲット分析と呼ばれる。ノンターゲット分析で

は、網羅的な化合物の探索を行う際に有効である。

[0004] 一方、試料に含まれているか否かを確認したい化合物、つまりターゲット化合物が決まっている場合には、その化合物に由来するイオンをモニターイオン（定量分析の場合には「定量イオン」又は「確認イオン」と呼ばれることが多い）として設定し、モニターイオンの質量電荷比（ m/z ：厳密には斜体字の「 m/z 」であるが、本明細書では「 m/z 」又は「質量電荷比」という）値又は保持時間（指標）などを用いて予め作成された分析メソッドを用いてガスクロマトグラフ質量分析装置を用いた分析を実行し、その分析結果から当該化合物を同定する。この手法はターゲット分析と呼ばれる。

[0005] ターゲット分析では、モニターイオンの m/z 値における抽出イオンクロマトグラム（慣用的に「マスキロマトグラム」ということもある）からピークを検出することができる。そのため、TIC上では隣接ピークに埋もれてしまうような微小なピークであっても、精度よく且つ効率的にピークを検出して化合物を同定することができる（「GC/MS法薬毒物データベース Ver. 2」、[Online]、[2021年11月30日検索]、株式会社島津製作所、インターネット<URL: <https://www.an.shimadzu.co.jp/gcms/dpd.htm>>参照）。特に、こうしたターゲット分析の同定精度の高さと効率性を活かしながら、複数の化合物を予めリストし、リストされた複数の化合物をターゲット化合物として探索する多成分一斉分析の手法は、ワイドターゲット分析として知られている。ワイドターゲット分析は、化合物の特徴的なイオンとマススペクトル、保持時間等の情報を用いて予め作成した各ターゲット化合物の分析メソッドを用いて化合物同定を行うので、ノンターゲット分析に比べ精度の高い化合物の同定を行うことができる。

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] ワイドターゲット分析では、種々のユーザの要求を満足するため、多種類、例えば、500～1000以上の化合物を予めリストし、500～100

0以上の全ての化合物の有無を予め定めた順番で一つずつ表示する。

[0007] しかし、各ユーザは、500～1000以上の全ての化合物の有無を確認したいわけではなく、確認したい化合物が異なる。よって、ユーザが確認したい化合物の有無の結果が表示されるまでに時間がかかってしまう場合がある。

[0008] 本開示の技術は、第1の数の化合物の中からユーザが確認したい第1の数より小さい第2の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる解析結果表示処理装置、解析結果表示処理方法、及び解析結果表示処理プログラムを提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0009] 上記目的を達成するため本開示の技術の第1の態様の解析結果表示処理装置は、試料に対してクロマトグラフと質量分析装置とを組み合わせた装置を用いて分析を実行して得られたクロマトグラムと、前記試料における第1の数の化合物の有無を確認するための第1の数の分析メソッドとを用いて行った、前記試料における前記第1の数の化合物の有無の解析結果を記憶する記憶装置と、前記第1の数の化合物の中から選択された前記第1の数より小さい第2の数の化合物の指定を受け付ける受付処理部と、前記記憶装置に記憶された前記第1の数の化合物の有無の解析結果の中から抽出した、前記第2の数の化合物の有無の解析結果が表示装置に表示されるように処理する表示処理部と、を備える。

[0010] 第2の態様は、第1の態様の解析結果表示処理装置の解析結果表示処理方法であって、前記受付処理部が、前記第1の数の化合物の中から選択された前記第1の数より小さい第2の数の化合物の指定を受け付けることと、前記表示処理部が、前記記憶装置に記憶された前記第1の数の化合物の有無の解析結果の中から抽出した、前記第2の数の化合物の有無の解析結果が表示装置に表示されるように処理することと、を備える。

[0011] 第3の態様の解析結果表示処理プログラムは、コンピュータを、第1の態様の前記受付処理部と前記表示処理部として機能させる。

[0012] 第4の態様の解析結果表示処理装置は、試料に対してクロマトグラフと質量分析装置とを組み合わせた装置を用いて分析を実行して得られたクロマトグラムを記憶する記憶装置と、前記マススペクトルと第1の数の化合物の有無を確認するための第1の数の分析メソッドとを用いて、前記試料における第1の数の化合物の有無の解析が可能な解析処理部と、解析結果が表示装置に表示されるように処理する表示処理部と、を備える解析結果表示処理装置であって、化合物の指定を受け付ける受付処理部を更に備え、前記解析処理部は、前記受付処理部により前記第1の数の化合物の中から選択された前記第1の数より小さい第2の数の化合物の指定が受け付けられた場合、前記第2の数の化合物の有無の解析を実行し、前記表示処理部は、前記第2の数の化合物の有無の解析結果が前記表示装置に表示されるように処理する。

[0013] 第5の態様は、第4の態様の解析結果表示処理装置の解析結果表示処理方法であって、前記解析処理部は、前記受付処理部により前記第1の数の化合物の中から選択された前記第1の数より小さい第2の数の化合物の指定が受け付けられた場合、前記第2の数の化合物の有無の解析を実行することと、前記表示処理部は、前記第2の数の化合物の有無の解析結果が前記表示装置に表示されるように処理することと、を含む。

[0014] 第6の態様の解析結果表示処理プログラムは、コンピュータを、第4の態様の前記解析処理部、前記受付処理部、及び前記表示処理部として機能させる。

発明の効果

[0015] 本開示の技術は、第1の数の化合物の中からユーザが確認したい第1の数より小さい第2の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

図面の簡単な説明

[0016] [図1]第1の実施の形態の解析結果表示処理システムの電気系のハードウェア構成及び要部機能の一例を示すブロック図である。

[図2]分析解析制御部の制御の内容の一例を示す概念図である。

[図3]受付処理部の処理の内容の一例を示す概念図である。

[図4]表示処理部の第1の表示処理の内容の一例を示す概念図である。

[図5]判断部の判断処理の内容の一例を示す概念図である。

[図6]表示処理部の第2の表示処理の内容の一例を示す概念図である。

[図7]第1の実施の形態の解析結果表示処理の流れの一例を示すフローチャートである。

[図8]トータルイオンクロマトグラムを示すグラフである。

[図9]試料における第1の数の化合物の有無を確認するための第1の数の分析メソッドの一例を示す概念図である。

[図10]第1の数より小さい第2の数の分析メソッドの一例を示す概念図である。

[図11]第2の数の化合物の中の指定された化合物の有無の解析結果のグラフ、第2の数の化合物の中の指定された化合物の有無の解析結果のデータ、及び第2の数の分析メソッドを表示した表示画面の一例を示す概念図である。

[図12]第1の数の中の第2の数以外の残りの分析メソッドの一例を示す概念図である。

[図13]第1の数の中の第2の数以外の残りの化合物の有無の解析結果のグラフ、残りの化合物の解析結果のデータ、及び残りの数の分析メソッドのメソッドファイルを表示した表示画面の一例を示す概念図である。

[図14]第2の実施の形態の解析結果表示処理の流れの一例を示すフローチャートである。

発明を実施するための形態

[0017] 以下、図面を参照して、本開示の技術の実施の形態を説明する。

[第1の実施の形態]

(構成)

図1は、第1の実施の形態の解析結果表示処理システムの電気系のハードウェア構成及び要部機能の一例を示すブロック図である。図1に示すように、解析結果表示処理システムは、ガスクロマトグラフ質量分析装置1と、解

析結果表示処理 20 と、を備える。

[0018] ガスクロマトグラフ質量分析装置 1 は、ガスクロマトグラフ 1 A と、質量分析装置 1 B と、アナログデジタル変換器 (ADC) 19 と、を備える。

[0019] ガスクロマトグラフ質量分析装置 1 は、本開示の技術の「クロマトグラフと質量分析装置とを組み合わせた装置」の一例である。

[0020] ガスクロマトグラフ 1 A は、微量の液体試料を気化させる試料気化室 1 0 と、試料気化室 1 0 中に液体試料を注入するマイクロシリンジ 1 1 と、試料中の化合物を時間方向に分離するカラム 1 3 と、カラム 1 3 を温調するカラムオーブン 1 2 と、を備える。なお、カラム 1 3 への試料導入部は、ヘッドスペース法などの適宜の方式の試料導入部に変更してもよい。

[0021] 質量分析装置 1 B は、図示しない真空ポンプにより真空排気されるチャンバ 1 4 の内部に、目的化合物を電子イオン化法などによりイオン化するイオン源 1 5 と、生成されたイオンを収束させるイオンレンズ 1 6 と、4 本のロッド電極から成る四重極マスフィルタ 1 7 と、四重極マスフィルタ 1 7 を通過して入射したイオンの量に応じた検出信号を出力するイオン検出器 1 8 と、を備える。イオン検出器 1 8 は例えばコンバージョンダイノードと電子増倍管との組み合わせから成るものであり、電子増倍管に印加される電圧（検出器電圧）によってイオン検出器 1 8 のゲインが調整される。なお、質量分析装置 1 B は、全イオン検出（T I M）（所謂、スキャン測定）を行う。具体的には、目的とする物質の検出に必要な質量範囲を全て（あるいは一部分）時間とともに連続的に走査してイオン強度を測定して質量スペクトルを得る。

[0022] アナログデジタル変換器（ADC）１９は、イオン検出器２３による検出信号をデジタルデータに変換し、解析結果表示処理２０に入力する。

[0023] 解析結果表示処理 20 は、コンピュータ 30 と、入力装置 40 と、表示装置 50 と、を備える。

[0024] コンピュータ30は、プロセッサ32、NVM (Non-volatile memory) 34、及びRAM (Random Access Memory) 36を備える。

mory) 38、記憶装置36と、を備える。プロセッサ32、NVM34、RAM38、及び記憶装置36は、バス35に接続されている。なお、記憶装置36は、コンピュータ30の外に備えるようにしてもよい。

[0025] プロセッサ32は、DSP (Digital Signal Processor)、CPU (Central Processing Unit)、及びGPU (Graphics Processing Unit) を含む処理装置であり、DSP及びGPUは、CPUの制御下で動作し、後述する処理の実行を担う。ここでは、プロセッサ32の一例として、DSP、CPU、及びGPUを含む処理装置を挙げているが、これはあくまでも一例に過ぎず、プロセッサ32は、GPU機能を統合した1つ以上のCPU及びDSPであってもよいし、GPU機能を統合していない1つ以上のCPU及びDSPであってもよいし、TPU (Tensor Processing Unit) が搭載されていてもよい。

[0026] NVM34は、各種プログラム及び各種パラメータ等を記憶する不揮発性の記憶装置である。NVM34としては、例えば、フラッシュメモリ（例えば、EEPROM (Electrically Erasable and Programmable Read Only Memory)）が挙げられる。

[0027] RAM38は、一時的に情報が記憶されるメモリであり、プロセッサ54によってワークメモリとして用いられる。RAM38としては、例えば、DRAM (Dynamic Random Access Memory) 又はSRAM (Static Random Access Memory) 等が挙げられる。

[0028] 本実施形態では、NVM34には、解析結果表示処理プログラム34Pが記憶されている。プロセッサ32は、解析結果表示処理プログラム34PをRAM38に展開して実行する。プロセッサ32が解析結果表示処理プログラム34Pを実行すると、プロセッサ32は、分析解析制御部32A、受付処理部32B、表示処理部32C、及び判断部32Dとして機能する。なお

、解析結果表示処理プログラム 34 P は、記憶装置 36 に記憶するようにしてもよい。

[0029] 記憶装置 36 は、不揮発性の記憶装置であり、例えば、SSD (Solid State Drive) 又は HDD (Hard Disk Drive) 等である。

[0030] 記憶装置 36 には、試料における第 1 の数の化合物の有無を確認するための第 1 の数の分析メソッドを記憶する分析メソッド記憶部 36 A と、試料における第 1 の数の化合物の有無の解析結果を記憶する解析結果記憶部 36 B と、を有する。

[0031] 分析メソッド記憶部 36 A には、ガスクロマトグラフ質量分析装置 1 において、試料についての分析を行うための測定条件が記憶されている。

[0032] 分析メソッド記憶部 36 A には、例えば、1000 個の化合物 A ~ 化合物 1000 の各々の識別情報 (例えば、名称) と、化合物情報と、が対応して記憶されている。例えば、1 番目の化合物については、名称としての「化合物 A」と、化合物情報としての「化合物情報 A」とが対応して記憶されている。「化合物 A」は、具体的には、例えば、(E)- β -オシメンである。化合物情報は、分析メソッドであり、化合物の固有の特徴量であり、他の化合物との違いを示す特徴量である。化合物情報には、例えば、保持時間、保持指標、質量 (= 質量電荷比 (m/z))、確認イオン、強度、及び設定 % 等がある。

[0033] 解析結果記憶部 36 B には、1000 個の化合物の名称に対応して、ガスクロマトグラフ質量分析装置 1 において上記測定条件での分析と解析とを行って、試料について各化合物の有無の解析結果が記憶されている。

[0034] 図 2 は、分析解析制御部 32 A の制御の内容の一例を示す概念図である。分析解析制御部 32 A は、分析メソッド記憶部 36 A から測定条件を取得し、取得した測定条件で、ガスクロマトグラフ質量分析装置 1 を制御、具体的には、試料を測定させ、クロマトグラム、例えば、トータルイオンカレントクロマトグラム (TIC) (図 8 も参照) を得る。分析解析制御部 32 A

は、トータルイオンカレントクロマトグラムと、分析メソッド記憶部 36 A から取得した第 1 の数の分析メソッドとを用いて試料における第 1 の数の化合物の有無の解析を行い、その解析結果を解析結果記憶部 36 B に記憶する。

[0035] 図 3 は、受付処理部 32 B の処理の内容の一例を示す概念図である。受付処理部 32 B は、第 1 の数の化合物の中から選択された第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の指定を受け付ける。第 2 の数は、第 1 の数である一例としての 1000 より小さい数であり、一例として、13 である。第 2 の数は、第 1 の数より小さい数であればよいので、13 に限定されず、上記例であれば、例えば、5、10、100 等でもよい。

[0036] 受付処理部 32 B の処理は、具体的には次の通りである。図 3 に示すように、まず、表示装置 50 の表示画面には、化合物情報表示エリア 50 I 1 と、ラジオボタン表示エリア 50 B とが表示される。

[0037] 化合物情報表示エリア 50 I 1 には、第 1 の数の化合物の各々の識別情報等が表示される。具体的には、化合物情報表示エリア 50 I 1 には、ID 番号 (ID #) に対応して、化合物名称、化合物情報 (保持時間、保持指標、質量、及び確認イオン等) が表示される。

[0038] ラジオボタン表示エリア 50 B には、各化合物に対応して、ユーザが解析結果の表示を希望する第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物を選択するためのラジオボタンが表示される。例えば、化合物 A に対応してラジオボタン 50 B 1、化合物 B に対応してラジオボタン 50 B 2 等が表示される。ユーザは、解析結果の表示を希望する化合物を選択するために、当該化合物に対応するラジオボタン (例えば、ラジオボタン 50 B 2) をクリックする。ユーザは、第 2 の数 (例えば 13) の化合物に対応するラジオボタンをクリックする。これにより受付処理部 32 B は、第 2 の数の化合物の指定を受け付ける。なお、受付処理部 32 B により第 2 の数の化合物の指定が受け付けられると、ユーザにより選択された化合物の化合物名称及び化合物情報 (保持時間、保持指標、質量、及び確認イオン等) が、表示装置 50 の化合物情報表

示エリア 5012 に表示される。

[0039] 図 4 は、表示処理部 32C の第 1 の表示処理の内容の一例を示す概念図である。表示処理部 32C は、記憶装置 36 に記憶された第 1 の数の化合物の有無の解析結果の中から抽出した、第 2 の数の化合物の有無の解析結果が表示装置 50 に表示されるように処理する。上記のように解析結果記憶部 36B には、試料について 1000 個の各化合物の有無の解析結果が記憶されているので、表示処理部 32C は、解析結果記憶部 36B に記憶された 1000 個の化合物の有無の解析結果の中から抽出した、13 個の化合物の有無の解析結果が、解析結果表示エリア 50D に表示されるように処理する。

[0040] 図 5 は、判断部 32D の判断処理の内容の一例を示す概念図である。判断部 32D は、入力装置 40 により非表示化合物表示ボタンがオンされ、オン信号が入力されたか否かを判断する。判断部 32D は、非表示化合物表示ボタンがオンされ、オン信号が入力されたと判断した場合、非表示化合物、即ち、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの少なくとも 1 つの化合物の解析結果を表示すべきである、と判断する。判断部 32D は、非表示化合物表示ボタンがオンされず、オン信号が入力されなかったと判断した場合、非表示化合物、即ち、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの少なくとも 1 つの化合物の解析結果を表示すべきではない、と判断する。

[0041] 図 6 は、表示処理部 32C の第 2 の表示処理の内容の一例を示す概念図である。表示処理部 32C は、受付処理部 32B が第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの少なくとも 1 つの化合物の指定を受け付けた場合、指定された化合物の解析結果が表示装置 50 に表示されるように処理する。具体的には、まず、表示装置 50 には、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の識別情報等が表示される。受付処理部 32B は、表示装置 50 に表示された上記残りの化合物の識別情報等の中から少なくとも 1 つの化合物の識別情報等が選択された場合に、当該少なくとも 1 つの化合物の指定を受け付ける。表示処理部 32C は、受付処理部 32B が

第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの少なくとも 1 つの化合物の指定を受け付けた場合、指定された化合物の解析結果が表示装置 5 0 に表示されるように処理する。

[0042] (作用)

次に、第 1 の実施の形態の解析結果表示処理を説明する。図 7 は、第 1 の実施の形態の解析結果表示処理の流れの一例を示すフローチャートである。

[0043] 上記のように第 1 の実施の形態では、解析結果記憶部 3 6 B (図 1 参照) には、ガスクロマトグラフ質量分析装置 1 において分析と解析とを行って、試料について 1 0 0 0 個の化合物の各々の有無の解析結果が記憶されている。図 8 に示すトータルイオンカレントクロマトグラム (T I C C) が得られている。

[0044] ユーザは、試料について所望の第 2 の数の化合物の各々の有無の解析結果を知りたいと思い、図示しないスタートボタンをオンする。これにより解析結果表示処理プログラム 3 2 P がスタートする。なお、プロセッサ 3 2 が解析結果表示処理プログラム 3 2 P を実行すると、図 7 の解析結果表示処理が実行される。

[0045] ステップ 1 0 4 で、表示処理部 3 2 C は、図 9 に示すように、表示装置 5 0 の表示画面 5 0 D の表示エリア 5 0 A 3 に、第 1 の数の化合物の化合物情報とラジオボタンとを対応して表示する。具体的には、表示エリア 5 0 A 3 には、化合物情報表示エリア 5 0 I 1 とラジオボタン表示エリア 5 0 B とがある。化合物情報表示エリア 5 0 I 1 には、第 1 の数の化合物の各々の識別情報等が表示される。具体的には、化合物情報表示エリア 5 0 I 1 には、I D 番号 (I D #) に対応して、化合物名称、化合物情報 (保持時間、保持指標、質量、及び確認イオン等) が表示される。ラジオボタン表示エリア 5 0 B には、各化合物に対応して、ユーザが解析結果の表示を希望する第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物を選択するためのラジオボタンが表示される。例えば、化合物 A に対応してラジオボタン 5 0 B 1、化合物 B に対応してラジオボタン 5 0 B 2 等が表示される。

このようにラジオボタン表示エリア50Bに、各化合物に対応して、ユーザが解析結果の表示を希望する第1の数より小さい第2の数の化合物を選択するためのラジオボタンが表示されるので、ユーザに化合物を容易に選択させることができる。

[0046] ステップ106で、判断部32Dは、第1の数の化合物の中から第2の数の化合物が指定されたか否かを判断する。

[0047] 上記のようにユーザは、試料について所望の第2の数の化合物の各々の有無の解析結果を知りたいので、第2の数の化合物の各々に対応するラジオボタンをクリックする。例えば、ユーザは、化合物Bの有無の解析結果を知りたい場合には、化合物Bに対応するラジオボタン50B2をクリックする。ユーザは、所望の第2の数の化合物の全てについてラジオボタンをクリックすると、完了ボタン50Cをクリックする。完了ボタン50Cがクリックされると、ステップ106の判断が肯定判定となる。

[0048] ステップ108で、表示処理部32Cは、図10に示すように、表示装置50の表示画面50Dの表示エリア50A3に、第2の数の化合物の化合物情報を表示する。表示エリア50A3には、第2の数（例えば、13）の化合物の化合物情報表示エリア50I2とラジオボタン表示エリア50Sとが対応して配置されている。なお、表示エリア50A3には、非表示化合物表示ボタン50A4及び終了ボタン50A5が表示される。

[0049] 表示処理部32Cは、化合物情報表示エリア50I2に、ID番号（ID#）に対応して、化合物名称、化合物情報（保持時間、保持指標、質量、及び確認イオン等）を表示する。

[0050] 表示処理部32Cは、ラジオボタン表示エリア50Bに、各化合物に対応して、ユーザが解析結果の表示を希望する第1の数より小さい第2の数の化合物を選択するためのラジオボタンを表示する。例えば、化合物Bに対応してラジオボタン50S1、及び化合物Mに対応してラジオボタン50S6等が表示される。

[0051] ところで、上記のようにユーザは、試料について所望の第2の数の化合物

の各々の有無の解析結果を知りたいので、第2の数の化合物の各々解析結果を一覧表示したり順に所定時間毎に連続して表示したりしてもよい。しかし、本実施の形態では、試料について所望の第2の数の化合物の各々の有無の解析結果を、第2の数の化合物の中の化合物が1つ選択される毎に、選択された化合物の解析結果を表示するようにしている。

[0052] 具体的には、ステップ110で、判断部32Dは、化合物が指定されたか否かを判断する。例えば、図10に示すように、ユーザは、化合物Mに対応するラジオボタン50S6をクリックする。このように1つのラジオボタンをクリックされると、ステップ110の判断が肯定判定となり、解析結果表示処理は、ステップ112に進む。ラジオボタンをクリックされていないと判断されると、ステップ110の判断が否定判定となり、解析結果表示処理は、ステップ112をスキップして、ステップ114に進む。

[0053] ステップ112では、表示処理部32Cは、図11に示すように、指定された化合物の解析結果を、表示エリア50A1及び表示エリア50A2に表示する。

[0054] 表示エリア50A1には、化合物Mに対応するラジオボタン50S6がクリックされた上記例では、化合物Mのマスクロマトグラム52A、試料における確認イオン（質量電荷比（ m/z ）=75.10）のマスクロマトグラム54A、及び試料における確認イオン（質量電荷比（ m/z ）=74.10）のマスクロマトグラム56Aが表示される。

[0055] 表示エリア50A2には、質量（＝質量電荷比（ m/z ））、強度、設定％、及び測定％が表示される。

[0056] 化合物Mのマスペクトルでは、質量電荷比（ m/z ）が102、74、75について強度が所定値以上である。そこで、質量電荷比（ m/z ）が102以下の確認イオンの中から、確認イオンとして質量電荷比（ m/z ）=74、75が選択された。

[0057] 強度は、質量（＝質量電荷比（ m/z ））で選択されたイオンの絶対強度である。定量イオンとして質量電荷比（ m/z ）=102の絶対強度は、1

6947である。確認イオンとして質量電荷比 (m/z) = 74 の絶対強度は、24024である。確認イオンとして質量電荷比 (m/z) = 75 の絶対強度は、19663である。

[0058] 設定%について説明する。化合物Mについては、質量電荷比 (m/z) = 102 の信号強度を100とした場合、これに対する確認イオンとして質量電荷比 (m/z) = 74 の信号強度の比 (設定%) は、141.00%である。質量電荷比 (m/z) = 102 の信号強度に対する確認イオンとして質量電荷比 (m/z) = 75 の信号強度の比 (設定%) は、124.34%である。

[0059] 測定%について説明する。質量電荷比 (m/z) = 102 の信号強度 (= 16947) を100とした場合、これに対する、試料における質量電荷比 (m/z) = 74 の信号強度 (= 24024) の比 (測定%) は、141.76%であった。質量電荷比 (m/z) = 102 の信号強度 (= 16947) を100とし、これに対する、試料における確認イオンとして質量電荷比 (m/z) = 75 の信号強度 (= 19663) の比 (測定%) は、116%であった。

[0060] 設定%と測定%との差が許容範囲以内であれば、試料には、化合物Mが存在すると判定し、設定%と測定%との差が許容範囲外であれば、試料には、化合物Mが存在しないと判定する。そして、試料に化合物Mが存在すると判定された場合、第1に、表示エリア50A1に、当該化合物が存在することを示すマーク70を試料における確認イオンのマスクロマトグラムのピークに付与する。第2に、表示エリア50A2の確認イオンの強度、設定%、及び測定%の各値を、試料に化合物Mが存在すると判定された場合の色 (例えば、黒) とは異なる色 (例えば、赤) で表示する。

[0061] 上記の例では、質量電荷比 (m/z) = 74 の設定%は、141.00%であり、試料における質量電荷比 (m/z) = 74 の測定%は、141.76%であった。質量電荷比 (m/z) = 75 の設定%は、124.34%であり、試料における質量電荷比 (m/z) = 75 の測定%は、116%であっ

た。

- [0062] 質量電荷比 (m/z) = 74 の信号強度の設定%と測定%との差が許容範囲以内であったので、第1に、質量電荷比 (m/z) = 74, 10 のマスクロマトグラム 56 A のピークにマーク70が付与される。第2に、質量電荷比 (m/z) = 74 の確認イオンの強度、設定%、及び測定%の各値を黒で表示する。質量電荷比 (m/z) = 75 の確認イオンの強度、設定%、及び測定%の各値を赤で表示する。
- [0063] ユーザは、第1に、マーク70の有無、第2に、確認イオンの強度、設定%、及び測定%の各値の色により、試料に化合物の有無の解析結果を知ることができる。
- [0064] 試料における化合物Mの有無の解析を、他の分析メソッド、例えば、保持時間及び保持指標の少なくとも1つを用いて行ってもよい。また、試料における化合物Mの有無の解析結果をマーク又は値の色で示すことに限定されず、文字（「有」又は「無」）で示すようにしてもよい。
- [0065] ステップ114で、判断部32Dは、非表示化合物表示ボタン50A4がオンされたか否かを判断する。非表示化合物表示ボタン50A4がオンされたと判断されなかった場合には、ステップ116で、判断部32Dは、終了ボタン50A5がオンされたか否かを判断する。終了ボタン50A5がオンされたと判断されなかった場合には、解析結果表示処理は、ステップ110に戻る。ステップ110から116までの処理を繰り返すと、第2の数の化合物の各々の解析結果が選択的に表示される。
- [0066] この点、従来では、第1の数の化合物の解析結果を予め定めた順番で一つずつ表示するので、ユーザが確認したい化合物の有無の結果が表示されるまでに時間がかかってしまっていた。しかし、ステップ110から116までの処理を繰り返すことにより、試料について第1の数の中の第2の数の化合物のみの有無の解析結果が表示され、ユーザは、各化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に知ることができる。このように本実施の形態では、第1の数の化合物の中からユーザが確認したい第1の数より小さい第2の数

の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

[0067] 以上のようにステップ 110 から 116 までの処理を繰り返すことにより、試料について第 1 の数の中の第 2 の数の化合物のみの有無の解析結果が表示され、第 1 の数の中の第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の有無の解析結果は表示されない。

[0068] ユーザは、第 1 の数の化合物の中の、確認したい第 2 の数の化合物の有無の解析結果を知ることができたので、解析結果表示処理を終了するため、終了ボタン 50A5 をオンする。これにより、解析結果表示処理は終了する。

[0069] しかし、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の有無の解析結果を知りたいと思う場合もある。そこで、本実施の形態では、上記のようにステップ 114 で、判断部 32D は、非表示化合物表示ボタン 50A4 がオンされたか否かを判断する。

[0070] 第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の有無の解析結果を知りたいと思うユーザは、非表示化合物表示ボタン 50A4 をオンする。これにより、判断部 32D は、オン信号が入力されたと判断し、非表示化合物、即ち、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの少なくとも 1 つの化合物の解析結果を表示すべきである、と判断し、ステップ 114 の判断が肯定判定となる。なお、判断部 32D は、非表示化合物表示ボタンがオンされず、オン信号が入力されなかった場合、非表示化合物、即ち、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの少なくとも 1 つの化合物の解析結果を表示すべきではない、と判断する。

[0071] ステップ 114 の判断が肯定判定となると、ステップ 118 で、表示処理部 32C は、図 12 に示すように、表示装置 50 の表示画面 50D の表示エリア 50A3 に、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の化合物情報を表示する。表示エリア 50A3 には、化合物情報表示エリア 50I3 とラジオボタン表示エリア 50D とがある。表示処理部 32C は、化合物情報表示エリア 50I3 に、上記残りの化合物の各々の識別情報等を表示する。具体的には、表示処理部 32C は、化合物情報表示エリア 5

013において、ID番号(ID#)に対応して、化合物名称、化合物情報(保持時間、保持指標、質量、及び確認イオン等)を表示する。表示処理部32Cは、ラジオボタン表示エリア50Dに、上記残りの化合物の各化合物に対応して、ラジオボタンを表示する。例えば、化合物Aに対応してラジオボタン50D1、化合物AGに対応してラジオボタン50D4等を表示する。なお、表示エリア50A3に、終了ボタン50A5が表示される。

ラジオボタン表示エリア50Dに、上記残りの化合物の各化合物に対応して、ラジオボタンを表示するので、ユーザに化合物を容易に選択させることができる。

[0072] ステップ120で、判断部32Dは、化合物が指定されたか否かを判断する。ユーザは、化合物AGの解析結果を知りたいと思う場合には、例えば、図12に示すように、ユーザは、化合物AGに対応するラジオボタン50D4をクリックする。このように1つのラジオボタンがクリックされると、ステップ120の判断が肯定判定となり、解析結果表示処理は、ステップ122に進む。ラジオボタンがクリックされていないと判断されると、ステップ120の判断が否定判定となり、解析結果表示処理は、ステップ122をスキップして、ステップ124に進む。

[0073] ステップ122では、表示処理部32Cは、図13に示すように、指定された化合物の解析結果を、表示エリア50A12及び表示エリア50A22に表示する。なお、ステップ122の処理は、ステップ112の処理と同様であるので、その説明を省略する。

[0074] ステップ124では、判断部32は、終了ボタン50A5がクリックされたか否かを判断することにより、ユーザにより解析結果表示処理の終了が指示されたか否かを判断する。終了ボタン50A5がクリックされたと判断されなかった場合には、解析結果表示処理は、ステップ120に戻る。終了ボタン50A5がクリックされたと判断された場合には、解析結果表示処理は終了する。

[0075] (効果)

以上説明したように第 1 の実施の形態では、ステップ 1 1 0 から 1 1 6 までの処理を繰り返すことにより、試料について第 1 の数の中の第 2 の数の化合物のみの有無の解析結果が表示され、ユーザは、各化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に知ることができる。このように本実施の形態では、第 1 の数の化合物の中からユーザが確認したい第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

また、第 1 の実施の形態では、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の有無の解析結果を表示することができる。

[0076] [第 2 の実施の形態]

(構成)

次に、本開示の技術の第 2 の実施の形態を説明する。第 2 の実施の形態の解析結果表示処理システムの構成は、第 1 の実施の形態の解析結果表示処理システムの構成と同様であるので、その説明を省略し、第 2 の実施の形態の解析結果表示処理を説明する。

[0077] 第 1 の実施の形態では、解析結果記憶部 3 6 B (図 1 参照) には、ガスクロマトグラフ質量分析装置 1 において、分析及び解析を行って、試料について 1 0 0 0 個の化合物の各々の有無の解析結果が記憶装置 3 6 に記憶されている。

[0078] これに対し第 2 の実施の形態では、分析解析制御部 3 2 A は、上記のように測定条件下、ガスクロマトグラフ質量分析装置 1 により試料を測定させ、トータルイオンカレントクロマトグラム (T I C C) を得て、トータルイオンカレントクロマトグラム (T I C C) を記憶装置 3 6 に記憶している。しかし、この段階では、分析解析制御部 3 2 A は、化合物の有無の解析を行っていない。

[0079] (作用)

図 1 4 は、第 2 の実施の形態の解析結果表示処理の流れの一例を示すフローチャートである。第 2 の実施の形態の解析結果表示処理は、第 1 の実施の

形態の解析結果表示処理と同様の作用部分があるので、同様の作用部分には同一の符号を付して、その説明を省略し、異なる部分を説明する。

[0080] ステップ110の判断が肯定判定の場合、ステップ111で、分析解析制御部32Aは、第2の数の化合物の中の指定された化合物の有無の解析を行う。具体的には、上記トータルイオンカレントクロマトグラム（TICC）と、指定された化合物の分析メソッドとを用いて、試料における上記指定された化合物の有無の解析を行う。

[0081] また、ステップ120の判断が肯定判定の場合、ステップ121で、分析解析制御部32Aは、第1の数の化合物の中の第2の数の化合物以外の残りの化合物の中の指定された化合物の有無の解析を行う。具体的には、上記トータルイオンカレントクロマトグラム（TICC）と、指定された化合物の分析メソッドとを用いて、試料における上記指定された化合物の有無の解析を行う。

[0082] （効果）

以上説明したように第2の実施の形態では、ステップ110、111、112、114、及び116までの処理を繰り返すことにより、試料について第1の数の中の第2の数の化合物のみの有無について解析し、その解析結果が表示される。第2の実施の形態でも、第1の数の化合物の解析結果を予め定めた順番で一つずつ表示する従来の技術より、ユーザは、各化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に知ることができる。このように本実施の形態では、第1の数の化合物の中からユーザが確認したい第1の数より小さい第2の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

[0083] なお、第2の実施の形態でも第1の実施の形態と同様に、ラジオボタン表示エリア50Bに、各化合物に対応して、ユーザが解析結果の表示を希望する第1の数より小さい第2の数の化合物を選択するためのラジオボタンが表示されるので（ステップ104（図9）参照）、ユーザに化合物を容易に選択させることができる。また、ラジオボタン表示エリア50Dに、上記残り

の化合物の各化合物に対応して、ラジオボタンを表示するので（ステップ 114（図 12）参照）、ユーザに化合物を容易に選択させることができる。更に、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の有無の解析結果を表示することができる。

[0084] [変形例]

上記各実施の形態では、図 9～図 13 には、ラジオボタンを表示しているが、本開示の技術は、これに限定されない。例えば、チェックボックスを表示してもよい。更に、ラジオボタン及びチェックボックスに代えて、ID 番号、化合物名称、化合物情報（保持時間、保持指標、質量、及び確認イオン等）をプルダウンメニューとして選択可能に表示してもよい。また、図 9～図 13 に示す各画面において化合物名のみ表示してもよい。

[0085] 上記各実施の形態では、質量分析装置 1B は、全イオン検出法（TIM）（所謂、スキャン測定）を行うが、本開示の技術はこれに限定されない。例えば、選択イオン検出法（SIM（Selected Ion Monitoring））又は選択反応検出法（SRM（Selected Reaction Monitoring）、MRM（Multiple Reaction Monitoring））を用いてもよい。

[0086] 上記各実施の形態では、ガスクロマトグラフ質量分析装置 1 を用いているが、本開示の技術はこれに限定されない。例えば、液体クロマトグラフ、超臨界クロマトグラフ等のクロマトグラフと質量分析装置とを組み合わせるクロマトグラフ質量分析装置を用いてもよい。

[0087] 上記各実施の形態では、解析結果表示処理 20 に含まれるコンピュータ 30 のプロセッサ 32 によって解析結果表示処理が行われる形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されず、解析結果表示処理を行う装置は、更に設けた少なくとも 1 台のサーバ及び／又は少なくとも 1 台のパーソナル・コンピュータ等でもよい。更に、解析結果表示処理は、解析結果表示処理装置 20 及び更に設けた少なくとも 1 台のサーバ及び／又は少なくとも 1 台のパーソナル・コンピュータ等で分散して行われるようにしてもよい。

[0088] 上記実施の形態では、N V M 3 4 に解析結果表示処理プログラム 3 2 P が記憶されている形態例を挙げて説明したが、本開示の技術はこれに限定されない。例えば、解析結果表示処理プログラム 3 2 P が S S D 又は U S B メモリなどの可搬型の非一時的コンピュータ可読媒体に記憶されていてもよい。非一時的記憶媒体に記憶されている解析結果表示処理プログラム 3 2 P は、解析結果表示処理装置 2 0 に含まれるコンピュータ 3 0 にインストールされる。プロセッサ 3 2 は、解析結果表示処理プログラム 3 2 P に従って解析結果表示処理を実行する。

[0089] また、ネットワークを介して解析結果表示処理 2 0 に接続される他のコンピュータ又はサーバ等の記憶装置に解析結果表示処理プログラム 3 2 P を記憶させておき、解析結果表示処理プログラム 3 2 P が他のコンピュータ又はサーバ等の記憶装置からダウンロードされ、コンピュータ 3 0 にインストールされるようにしてもよい。

[0090] 解析結果表示処理を実行するハードウェア資源としては、次に示す各種のプロセッサを用いることができる。プロセッサとしては、例えば、ソフトウェア、すなわち、プログラムを実行することで、解析結果表示処理を実行するハードウェア資源として機能する汎用的なプロセッサである C P U が挙げられる。また、プロセッサとしては、例えば、F P G A、P L D、又は A S I C などの特定の処理を実行させるために専用に設計された回路構成を有するプロセッサである専用電気回路が挙げられる。何れのプロセッサにもメモリが内蔵又は接続されており、何れのプロセッサもメモリを使用することで解析結果表示処理を実行する。

[0091] 解析結果表示処理を実行するハードウェア資源は、これらの各種のプロセッサのうちの 1 つで構成されてもよいし、同種または異種の 2 つ以上のプロセッサの組み合わせ（例えば、複数の F P G A の組み合わせ、又は C P U と F P G A との組み合わせ）で構成されてもよい。

[0092] 1 つのプロセッサで構成する例としては、第 1 に、1 つ以上の C P U とソフトウェアの組み合わせで 1 つのプロセッサを構成し、このプロセッサが、

解析結果表示処理を実行するハードウェア資源として機能する形態がある。第2に、S o Cなどに代表されるように、解析結果表示処理を実行する複数のハードウェア資源を含むシステム全体の機能を1つのI Cチップで実現するプロセッサを使用する形態がある。このように、解析結果表示処理は、ハードウェア資源として、上記各種のプロセッサの1つ以上を用いて実現される。

[0093] 更に、これらの各種のプロセッサのハードウェア的な構造としては、より具体的には、半導体素子などの回路素子を組み合わせた電気回路を用いることができる。また、上記の解析結果表示処理はあくまでも一例である。従って、主旨を逸脱しない範囲内において不要なステップを削除したり、新たなステップを追加したり、処理順序を入れ替えたりしてもよいことは言うまでもない。

[0094] 以上に示した記載内容及び図示内容は、本開示の技術に係る部分についての詳細な説明であり、本開示の技術の一例に過ぎない。例えば、上記の構成、機能、作用、及び効果に関する説明は、本開示の技術に係る部分の構成、機能、作用、及び効果の一例に関する説明である。よって、本開示の技術の主旨を逸脱しない範囲内において、以上に示した記載内容及び図示内容に対して、不要な部分を削除したり、新たな要素を追加したり、置き換えたりしてもよいことは言うまでもない。また、錯綜を回避し、本開示の技術に係る部分の理解を容易にするために、以上に示した記載内容及び図示内容では、本開示の技術の実施を可能にする上で特に説明を要しない技術常識等に関する説明は省略されている。

[0095] 本明細書に記載された全ての文献、特許出願及び技術規格は、個々の文献、特許出願及び技術規格が参照により取り込まれることが具体的かつ個々に記された場合と同程度に、本明細書中に参照により取り込まれる。

[0096] [態様]

上述した各実施の形態は、以下の態様の具体例であることが当業者により理解される。

[0097] (第1項)

試料に対してクロマトグラフと質量分析装置とを組み合わせた装置を用いて分析を実行して得られたクロマトグラムと、前記試料における第1の数の化合物の有無を確認するための第1の数の分析メソッドとを用いて行った、前記試料における前記第1の数の化合物の有無の解析結果を記憶する記憶装置と、

前記第1の数の化合物の中から選択された前記第1の数より小さい第2の数の化合物の指定を受け付ける受付処理部と、

前記記憶装置に記憶された前記第1の数の化合物の有無の解析結果の中から抽出した、前記第2の数の化合物の有無の解析結果が表示装置に表示されるように処理する表示処理部と、

を備える解析結果表示処理装置。

[0098] 第1項の解析結果表示処理装置によれば、第1の数の化合物の中からユーザが確認したい第1の数より小さい第2の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

[0099] (第2項)

前記表示装置には、前記第1の数の化合物の各々の識別情報が表示され、

前記受付処理部は、前記表示装置に表示された前記第1の数の化合物の識別情報の中から前記第2の数の化合物の識別情報が選択された場合に、前記第2の数の化合物の指定を受け付ける、

請求項1に記載の解析結果表示処理装置。

[0100] 第2項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0101] (第3項)

前記表示処理部は、前記受付処理部が前記第1の数の化合物の中の前記第2の数の化合物以外の残りの少なくとも1つの化合物の指定を受け付けた場合、前記指定された化合物の解析結果が前記表示装置に表示されるように処理する、請求項1又は請求項2に記載の解析結果表示処理装置。

[0102] 第3項の解析結果表示処理装置によれば、第1の数の化合物の中の第2の数の化合物以外の残りの少なくとも1つの化合物の解析結果も表示することができる。

[0103] (第4項)

前記表示装置には、前記第1の数の化合物の中の前記第2の数の化合物以外の残りの化合物の識別情報が表示され、

前記受付処理部は、前記表示装置に表示された前記残りの化合物の識別情報の中から前記少なくとも1つの化合物の識別情報が選択された場合に、前記少なくとも1つの化合物の指定を受け付ける、

請求項3に記載の解析結果表示処理装置。

[0104] 第4項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0105] (第5項)

前記表示装置には、前記化合物の識別情報と選択欄とが対応して表示され、

前記受付処理部は、前記選択欄が選択された場合、前記選択欄に対応する前記識別情報が選択されたとして、前記化合物の指定を受け付ける、

請求項2又は請求項4に記載の解析結果表示処理装置。

[0106] 第5項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0107] (第6項)

前記選択欄は、ラジオボタン又はチェックボックスである、請求項5に記載の解析結果表示処理装置。

[0108] 第6項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0109] (第7項)

前記表示装置には、前記第1の数の化合物の各々の識別情報がプルダウンメニューで表示される、請求項2に記載の解析結果表示処理装置。

[0110] 第7項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0111] (第8項)

前記表示装置には、前記第1の数の化合物の中の前記第2の数の化合物以外の残りの化合物の識別情報がプルダウンメニューで表示される請求項4に記載の解析結果表示処理装置。

[0112] 第8項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0113] (第9項)

第1項の解析結果表示処理装置の解析結果表示処理方法であって、
前記受付処理部が、前記第1の数の化合物の中から選択された前記第1の数より小さい第2の数の化合物の指定を受け付けることと、

前記表示処理部が、前記記憶装置に記憶された前記第1の数の化合物の有無の解析結果の中から抽出した、前記第2の数の化合物の有無の解析結果が表示装置に表示されるように処理することと、

を備える解析結果表示処理方法。

[0114] 第9項の解析結果表示処理方法によれば、第1の数の化合物の中からユーザが確認したい第1の数より小さい第2の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

[0115] (第10項)

コンピュータを、請求項1の前記受付処理部と前記表示処理部として機能させる解析結果表示処理プログラム。

[0116] 第10項の解析結果表示処理プログラムによれば、第1の数の化合物の中からユーザが確認したい第1の数より小さい第2の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

[0117] (第11項)

試料に対してクロマトグラフと質量分析装置とを組み合わせた装置を用いて分析を実行して得られたクロマトグラムを記憶する記憶装置と、

前記マススペクトルと第 1 の数の化合物の有無を確認するための第 1 の数の分析メソッドとを用いて、前記試料における第 1 の数の化合物の有無の解析が可能な解析処理部と、

解析結果が表示装置に表示されるように処理する表示処理部と、

を備える解析結果表示処理装置であって、

化合物の指定を受け付ける受付処理部を更に備え、

前記解析処理部は、前記受付処理部により前記第 1 の数の化合物の中から選択された前記第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の指定が受け付けられた場合、前記第 2 の数の化合物の有無の解析を実行し、

前記表示処理部は、前記第 2 の数の化合物の有無の解析結果が前記表示装置に表示されるように処理する、

解析結果表示処理装置。

[0118] 第 1 1 項の解析結果表示処理装置によれば、第 1 の数の化合物の中からユーザが確認したい第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

[0119] (第 1 2 項)

前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の各々の識別情報が表示され、

前記受付処理部は、前記表示装置に表示された前記第 1 の数の化合物の識別情報の中から前記第 2 の数の化合物の識別情報が選択された場合に、前記第 2 の数の化合物の指定を受け付ける、

請求項 1 1 に記載の解析結果表示処理装置。

[0120] 第 1 2 項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0121] (第 1 3 項)

前記解析処理部は、前記受付処理部が前記第 1 の数の化合物の中の前記第 2 の数の化合物以外の残りの少なくとも 1 つの化合物の指定を受け付けた場合、前記指定された化合物の解析の有無の解析を実行し、

前記表示処理部は、前記指定された化合物の有無の解析結果が前記表示装

置に表示されるように処理する、

請求項 1 1 又は請求項 1 2 に記載の解析結果表示処理装置。

[0122] 第 1 3 項の解析結果表示処理装置によれば、第 1 の数の化合物の中の第 2 の数の化合物以外の残りの少なくとも 1 つの化合物の解析結果も表示することができる。

[0123] (第 1 4 項)

前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の中の前記第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の識別情報が表示され、

前記受付処理部は、前記表示装置に表示された前記残りの化合物の識別情報の中から前記少なくとも 1 つの化合物の識別情報が選択された場合に、前記少なくとも 1 つの化合物の指定を受け付ける、

請求項 1 3 に記載の解析結果表示処理装置。

[0124] 第 1 4 項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0125] (第 1 5 項)

前記表示装置には、前記化合物の識別情報と選択欄とが対応して表示され、

前記受付処理部は、前記選択欄が選択された場合、前記選択欄に対応する前記識別情報が選択されたとして、前記化合物の指定を受け付ける、

請求項 1 2 又は請求項 1 4 に記載の解析結果表示処理装置。

[0126] 第 1 5 項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

(第 1 6 項)

前記選択欄は、ラジオボタン又はチェックボックスである、請求項 1 5 に記載の解析結果表示処理装置。

[0127] 第 1 6 項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0128] (第 1 7 項)

前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の各々の識別情報がプルダウンメニューで表示される、請求項 1 2 に記載の解析結果表示処理装置。

[0129] 第 1 7 項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0130] (第 1 8 項)

前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の中の前記第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の識別情報がプルダウンメニューで表示される請求項 1 4 に記載の解析結果表示処理装置。

[0131] 第 1 8 項の解析結果表示処理装置によれば、識別情報を容易に選択させることができる。

[0132] (第 1 9 項)

第 1 1 項の解析結果表示処理装置の解析結果表示処理方法であって、

前記解析処理部は、前記受付処理部により前記第 1 の数の化合物の中から選択された前記第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の指定が受け付けられた場合、前記第 2 の数の化合物の有無の解析を実行することと、

前記表示処理部は、前記第 2 の数の化合物の有無の解析結果が前記表示装置に表示されるように処理することと、

を含む解析結果表示処理方法。

[0133] 第 1 9 項の解析結果表示処理方法によれば、第 1 の数の化合物の中からユーザが確認したい第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

[0134] (第 2 0 項)

コンピュータを、第 1 1 項の前記解析処理部、前記受付処理部、及び前記表示処理部として機能させる解析結果表示処理プログラム。

[0135] 第 2 0 項の解析結果表示処理プログラムによれば、第 1 の数の化合物の中からユーザが確認したい第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

[0136] (第 2 1 項)

コンピュータを、請求項 1 の前記受付処理部と前記表示処理部として機能させる解析結果表示処理プログラムを記憶する非一時的コンピュータ可読媒体。

[0137] 第 2 1 項の解析結果表示処理プログラムによれば、第 1 の数の化合物の中からユーザが確認したい第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

[0138] (第 2 2 項)

コンピュータを、第 1 1 項の前記解析処理部、前記受付処理部、及び前記表示処理部として機能させる解析結果表示処理プログラムを記憶する非一時的コンピュータ可読媒体。

[0139] 第 2 2 項の解析結果表示処理プログラムによれば、第 1 の数の化合物の中からユーザが確認したい第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の有無の解析結果を従来技術より短時間に提供することができる。

請求の範囲

- [請求項1] 試料に対してクロマトグラフと質量分析装置とを組み合わせた装置を用いて分析を実行して得られたクロマトグラムと、前記試料における第1の数の化合物の有無を確認するための第1の数の分析メソッドとを用いて行った、前記試料における前記第1の数の化合物の有無の解析結果を記憶する記憶装置と、
- 前記第1の数の化合物の中から選択された前記第1の数より小さい第2の数の化合物の指定を受け付ける受付処理部と、
- 前記記憶装置に記憶された前記第1の数の化合物の有無の解析結果の中から抽出した、前記第2の数の化合物の有無の解析結果が表示装置に表示されるように処理する表示処理部と、
- を備える解析結果表示処理装置。
- [請求項2] 前記表示装置には、前記第1の数の化合物の各々の識別情報が表示され、
- 前記受付処理部は、前記表示装置に表示された前記第1の数の化合物の識別情報の中から前記第2の数の化合物の識別情報が選択された場合に、前記第2の数の化合物の指定を受け付ける、
- 請求項1に記載の解析結果表示処理装置。
- [請求項3] 前記表示処理部は、前記受付処理部が前記第1の数の化合物の中の前記第2の数の化合物以外の残りの少なくとも1つの化合物の指定を受け付けた場合、前記指定された化合物の解析結果が前記表示装置に表示されるように処理する、請求項1又は請求項2に記載の解析結果表示処理装置。
- [請求項4] 前記表示装置には、前記第1の数の化合物の中の前記第2の数の化合物以外の残りの化合物の識別情報が表示され、
- 前記受付処理部は、前記表示装置に表示された前記残りの化合物の識別情報の中から前記少なくとも1つの化合物の識別情報が選択された場合に、前記少なくとも1つの化合物の指定を受け付ける、

請求項 3 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項5] 前記表示装置には、前記化合物の識別情報と選択欄とが対応して表示され、

前記受付処理部は、前記選択欄が選択された場合、前記選択欄に対応する前記識別情報が選択されたとして、前記化合物の指定を受け付ける、

請求項 2 又は請求項 4 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項6] 前記選択欄は、ラジオボタン又はチェックボックスである、請求項 5 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項7] 前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の各々の識別情報がプルダウンメニューで表示される、請求項 2 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項8] 前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の中の前記第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の識別情報がプルダウンメニューで表示される請求項 4 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項9] 請求項 1 の解析結果表示処理装置の解析結果表示処理方法であって、

前記受付処理部が、前記第 1 の数の化合物の中から選択された前記第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の指定を受け付けることと、

前記表示処理部が、前記記憶装置に記憶された前記第 1 の数の化合物の有無の解析結果の中から抽出した、前記第 2 の数の化合物の有無の解析結果が表示装置に表示されるように処理することと、

を備える解析結果表示処理方法。

[請求項10] コンピュータを、請求項 1 の前記受付処理部と前記表示処理部として機能させる解析結果表示処理プログラム。

[請求項11] 試料に対してクロマトグラフと質量分析装置とを組み合わせた装置を用いて分析を実行して得られたクロマトグラムを記憶する記憶装置と、

前記マススペクトルと第 1 の数の化合物の有無を確認するための第 1 の数の分析メソッドとを用いて、前記試料における第 1 の数の化合物の有無の解析が可能な解析処理部と、

解析結果が表示装置に表示されるように処理する表示処理部と、
を備える解析結果表示処理装置であって、

化合物の指定を受け付ける受付処理部を更に備え、

前記解析処理部は、前記受付処理部により前記第 1 の数の化合物の中から選択された前記第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の指定が受け付けられた場合、前記第 2 の数の化合物の有無の解析を実行し、

前記表示処理部は、前記第 2 の数の化合物の有無の解析結果が前記表示装置に表示されるように処理する、

解析結果表示処理装置。

[請求項12] 前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の各々の識別情報が表示され、

前記受付処理部は、前記表示装置に表示された前記第 1 の数の化合物の識別情報の中から前記第 2 の数の化合物の識別情報が選択された場合に、前記第 2 の数の化合物の指定を受け付ける、

請求項 1 1 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項13] 前記解析処理部は、前記受付処理部が前記第 1 の数の化合物の中の前記第 2 の数の化合物以外の残りの少なくとも 1 つの化合物の指定を受け付けた場合、前記指定された化合物の解析の有無の解析を実行し、

前記表示処理部は、前記指定された化合物の有無の解析結果が前記表示装置に表示されるように処理する、

請求項 1 1 又は請求項 1 2 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項14] 前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の中の前記第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の識別情報が表示され、

前記受付処理部は、前記表示装置に表示された前記残りの化合物の

識別情報の中から前記少なくとも 1 つの化合物の識別情報が選択された場合に、前記少なくとも 1 つの化合物の指定を受け付ける、

請求項 1 3 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項15] 前記表示装置には、前記化合物の識別情報と選択欄とが対応して表示され、

前記受付処理部は、前記選択欄が選択された場合、前記選択欄に対応する前記識別情報が選択されたとして、前記化合物の指定を受け付ける、

請求項 1 2 又は請求項 1 4 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項16] 前記選択欄は、ラジオボタン又はチェックボックスである、請求項 1 5 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項17] 前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の各々の識別情報がプルダウンメニューで表示される、請求項 1 2 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項18] 前記表示装置には、前記第 1 の数の化合物の中の前記第 2 の数の化合物以外の残りの化合物の識別情報がプルダウンメニューで表示される請求項 1 4 に記載の解析結果表示処理装置。

[請求項19] 請求項 1 1 の解析結果表示処理装置の解析結果表示処理方法であって、

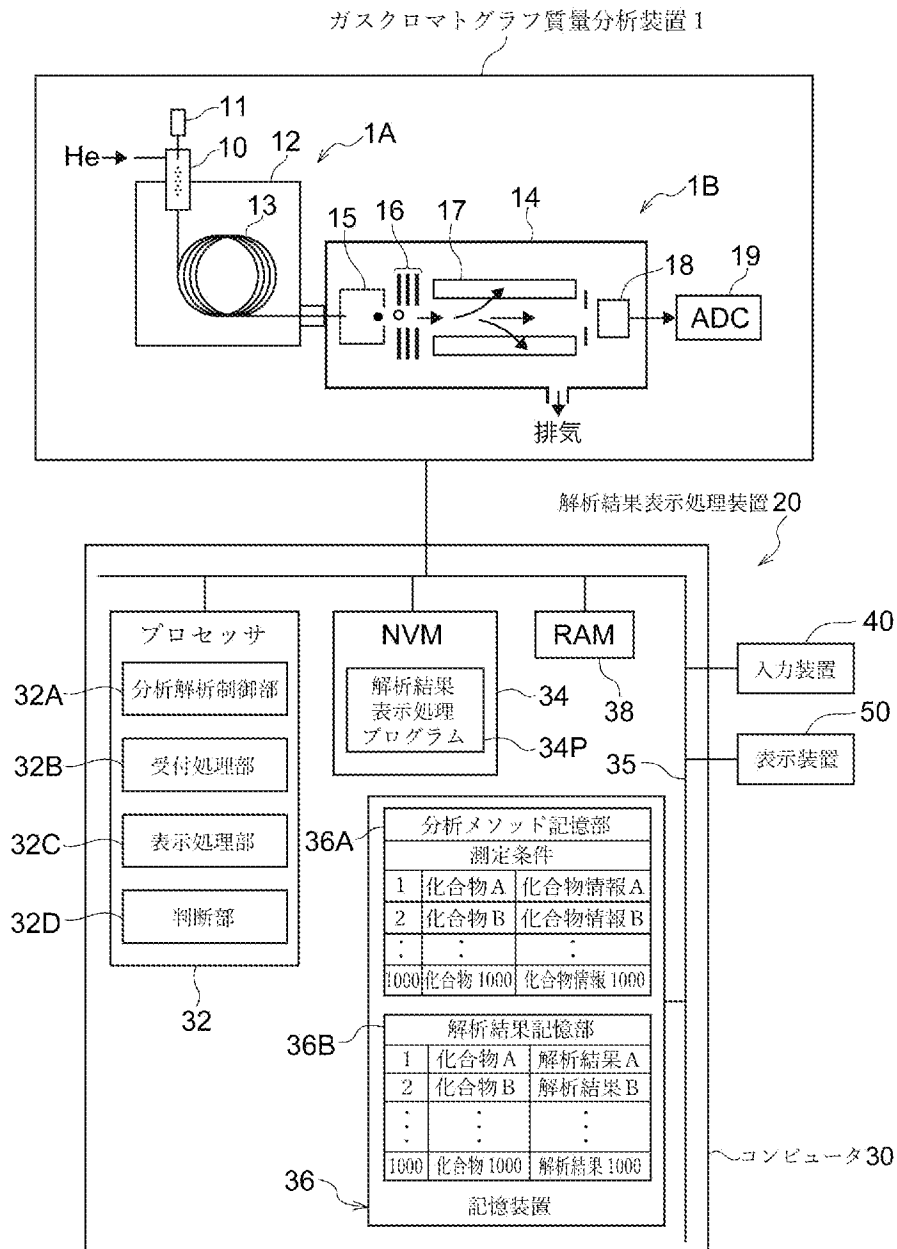
前記解析処理部は、前記受付処理部により前記第 1 の数の化合物の中から選択された前記第 1 の数より小さい第 2 の数の化合物の指定が受け付けられた場合、前記第 2 の数の化合物の有無の解析を実行することと、

前記表示処理部は、前記第 2 の数の化合物の有無の解析結果が前記表示装置に表示されるように処理することと、

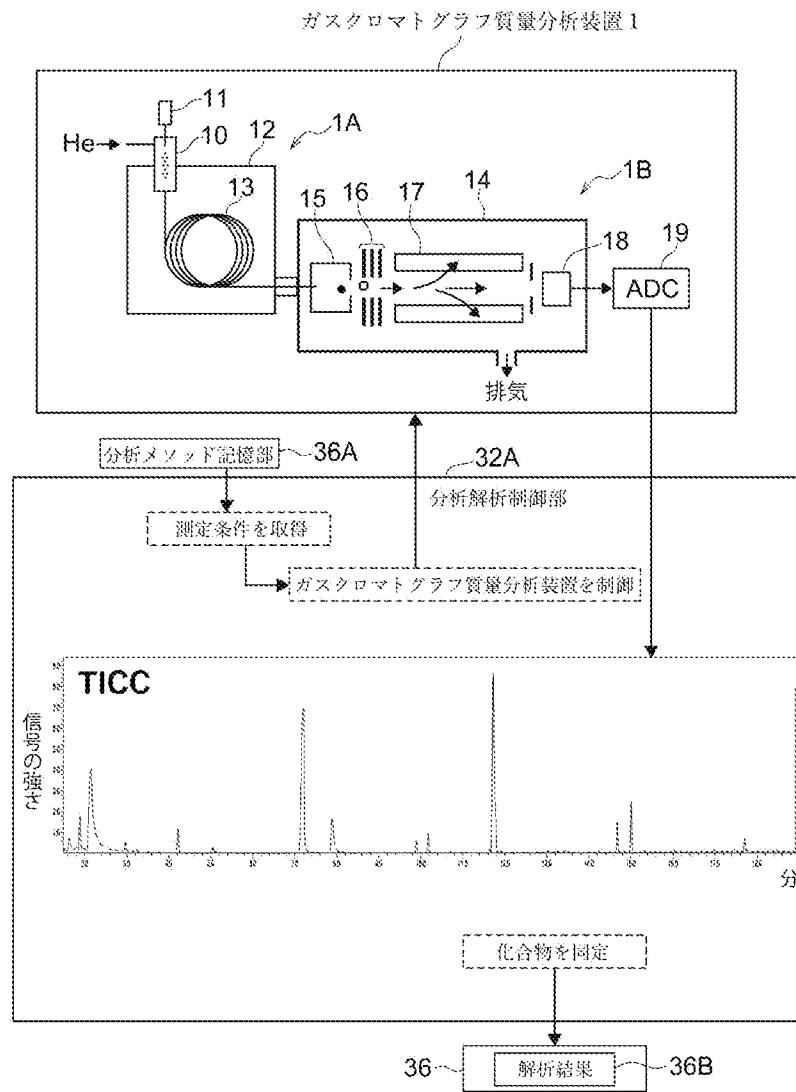
を含む解析結果表示処理方法。

[請求項20] コンピュータを、請求項 1 1 の前記解析処理部、前記受付処理部、及び前記表示処理部として機能させる解析結果表示処理プログラム。

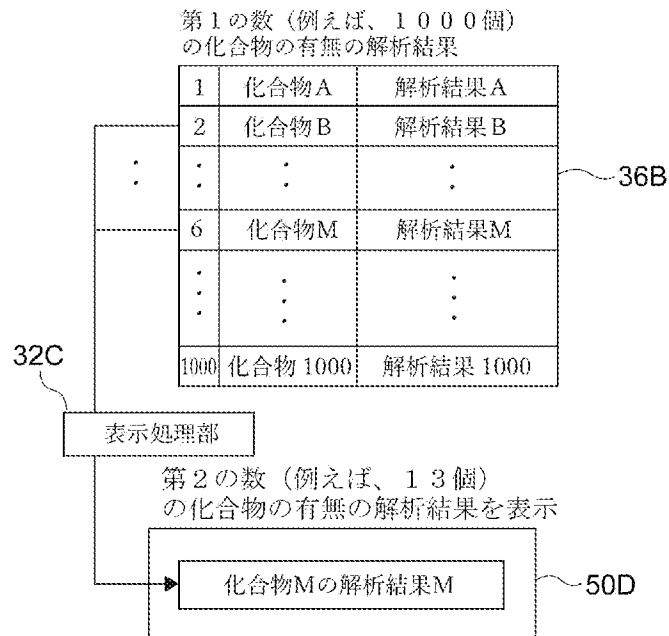
[図1]



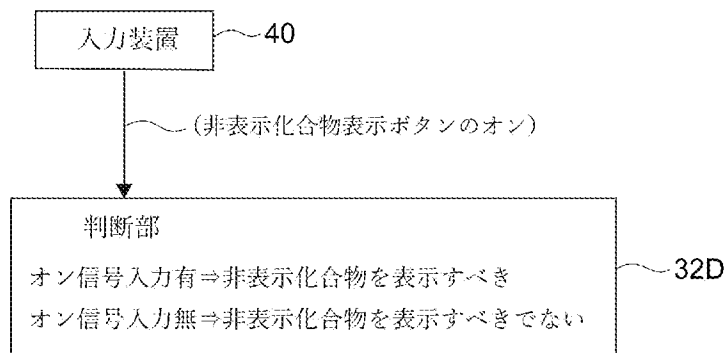
[図2]



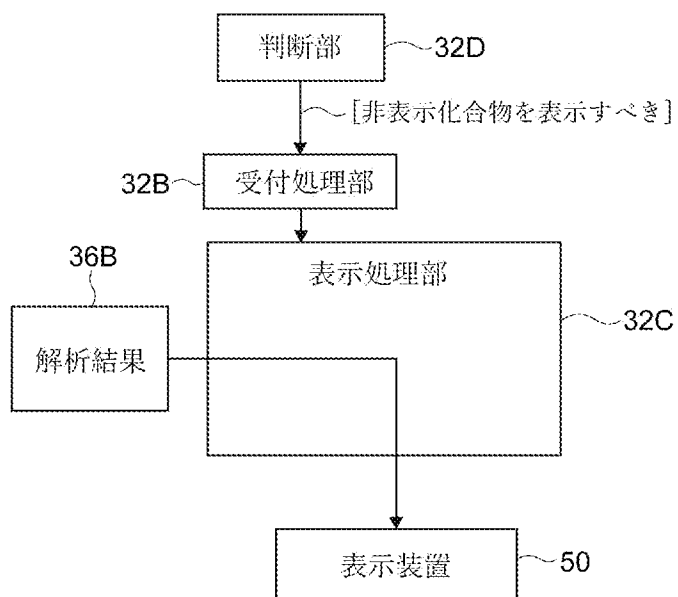
[図4]



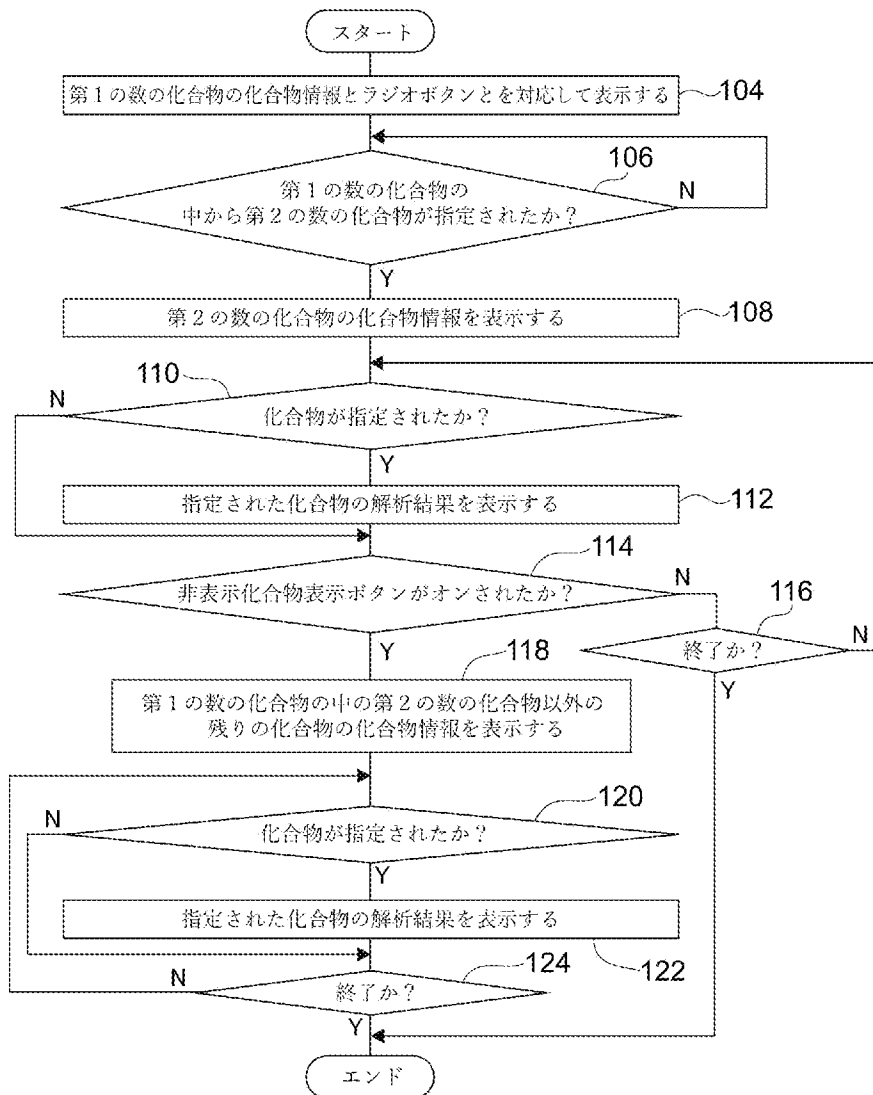
[図5]



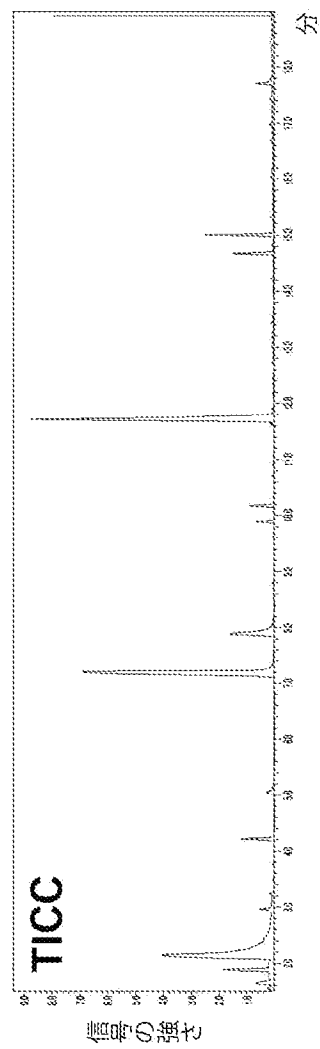
[図6]



[図7]



[図8]



【図9】

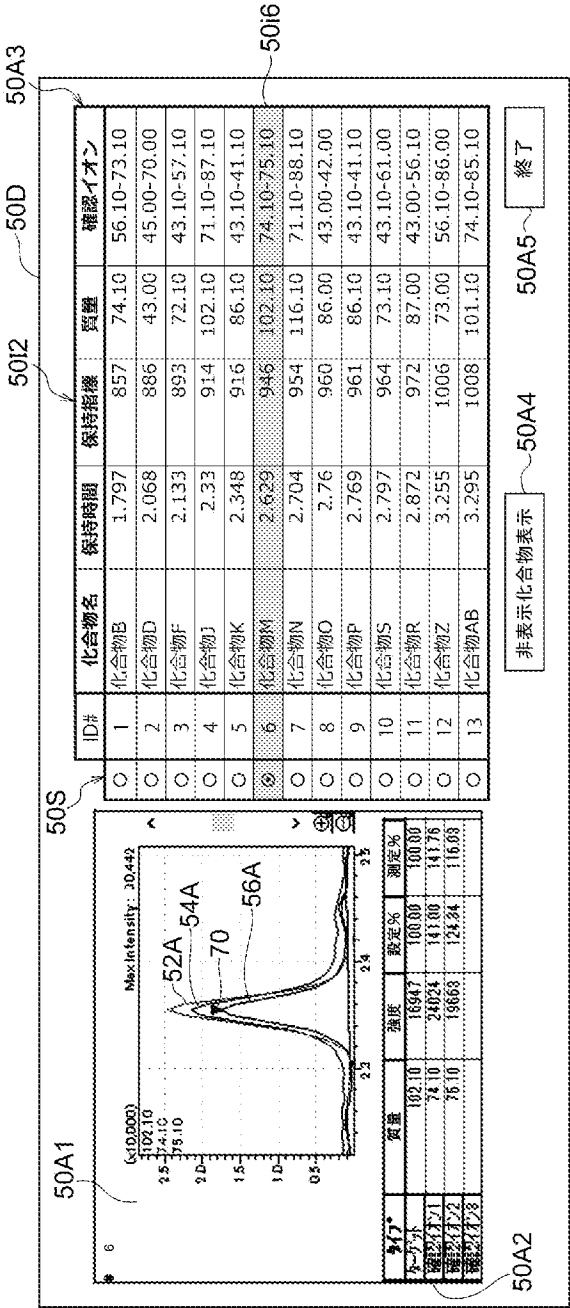
100#	化合物名	保持時間	保持量	濃度 (%)
1	1,2-二氯乙烷	1.75	850	52.10-51.10
2	1,1-二氯乙烷	1.79	837	55.10-73.10
3	1,1-二氯丙烷	2.01	858	74.10
4	1,2-二氯丙烷	2.12	865	44.10-57.10
5	1,1-二氯丁烷	2.30	835	43.00
6	1,2-二氯丁烷	2.33	832	45.00-70.00
7	1,1-二氯戊烷	2.53	842	45.10-73.10
8	1,2-二氯戊烷	2.52	845	42.10-57.10
9	1,1-二氯己烷	2.74	802	75.10-82.00
10	1,2-二氯己烷	2.74	808	68.10
11	1,1-二氯庚烷	2.80	814	57.10-58.10
12	1,2-二氯庚烷	2.80	814	52.00-58.00
13	1,1-二氯辛烷	3.42	815	71.10-87.10
14	1,2-二氯辛烷	3.57	825	68.10
15	1,1-二氯壬烷	3.67	847	43.10-53.10
16	1,2-二氯壬烷	3.67	847	74.10-75.10
17	1,1-二氯癸烷	3.94	854	116.10
18	1,2-二氯癸烷	3.94	854	71.10-88.10
19	1,1-二氯十一烷	3.95	860	68.00
20	1,2-二氯十一烷	3.95	860	43.00-42.00
21	1,1-二氯十二烷	3.98	863	68.10
22	1,2-二氯十二烷	3.98	863	43.10-41.10
23	1,1-二氯十三烷	4.01	867	58.10
24	1,2-二氯十三烷	4.01	867	44.10-57.10
25	1,1-二氯十四烷	4.25	862	57.10-56.10

完了

[図10]

		50I2		50D		50A3	
50S		50I2		50D		50A3	
50S1	○	ID#	化合物名	保持時間	保持指標	質量	確認イオン
	○	1	化合物B	1.797	857	74.1	56.10-73.10
	○	2	化合物D	2.068	886	43	45.00-70.00
	○	3	化合物F	2.133	893	72.1	43.10-57.10
	○	4	化合物J	2.33	914	102.1	71.10-87.10
	○	5	化合物K	2.348	916	86.1	43.10-41.10
	◎	6	化合物M	2.629	946	102.1	74.10-75.10
	○	7	化合物N	2.704	954	116.1	71.10-88.10
	○	8	化合物O	2.76	960	86	43.00-42.00
	○	9	化合物P	2.769	961	86.1	43.10-41.10
	○	10	化合物S	2.797	964	73.1	43.10-61.00
	○	11	化合物R	2.872	972	87	43.00-56.10
	○	12	化合物Z	3.255	1006	73	56.10-86.00
	○	13	化合物AB	3.295	1008	101.1	74.10-85.10
50S6		50I2		50D		50A3	
		非表示化合物表示		50A4		終了	
						50A5	

[図11]



[図12]

50D

50I3

50A3

50I4

50D

50D1

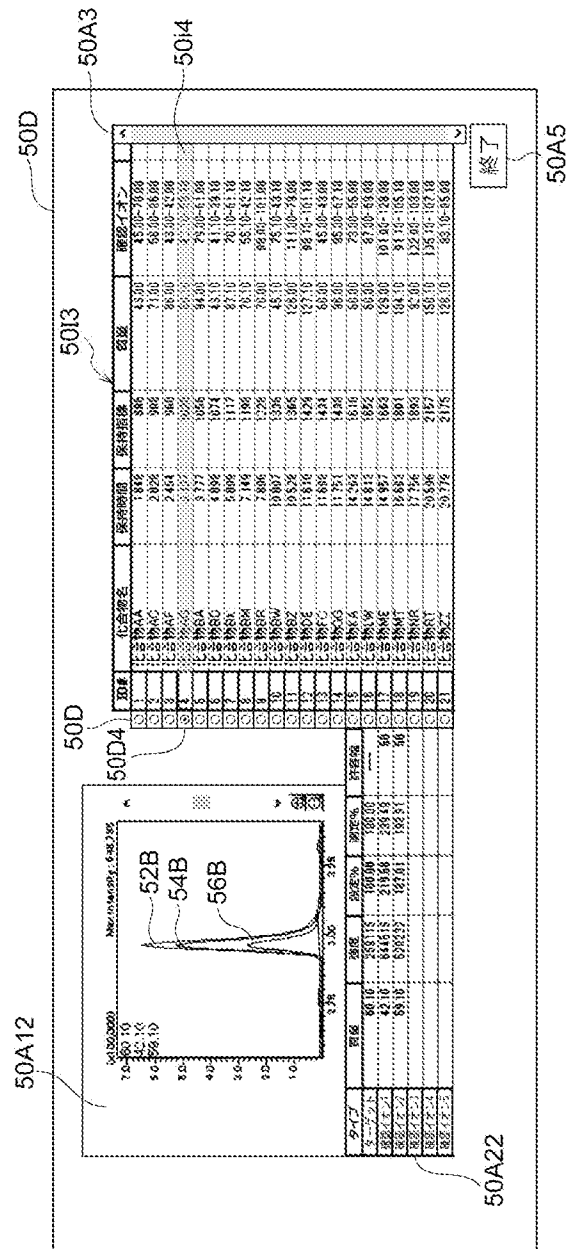
50D4

終了

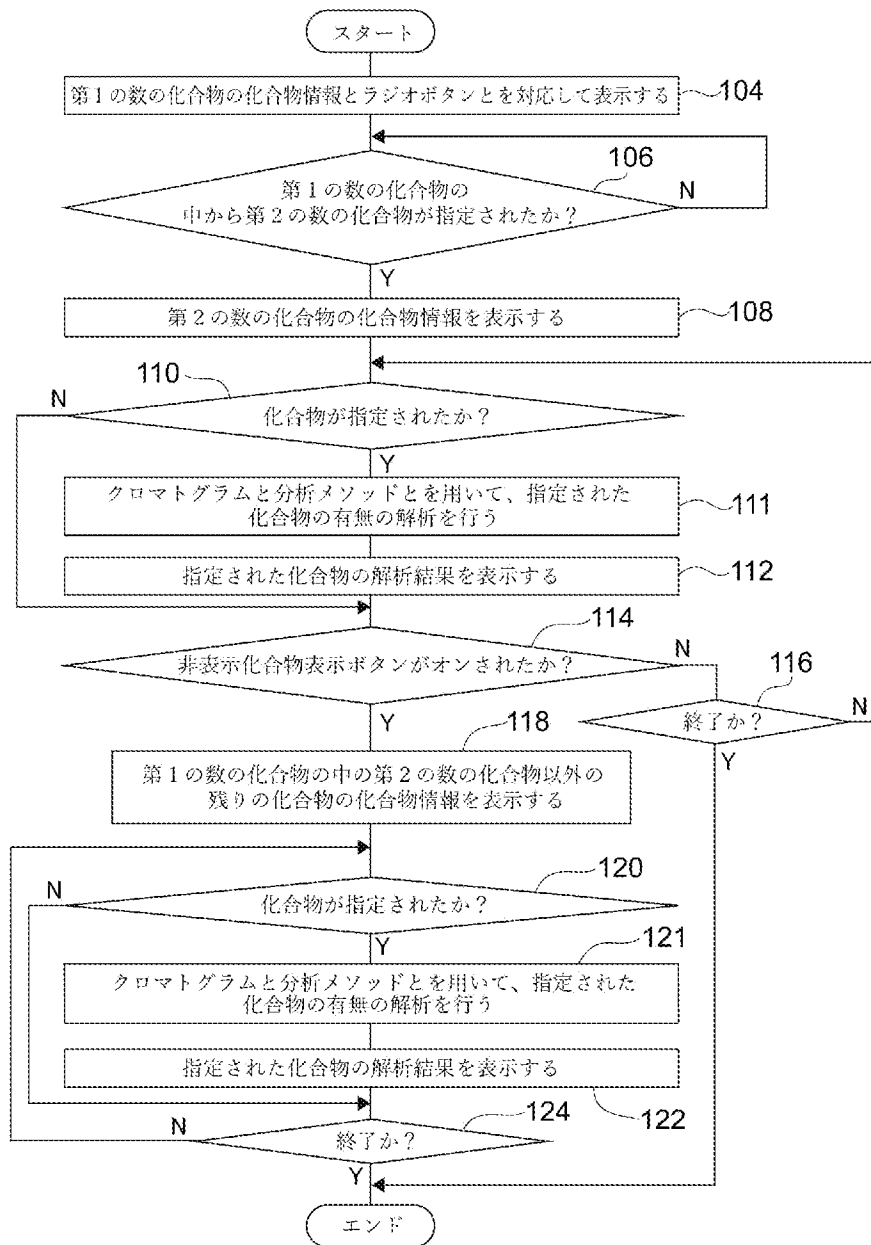
50A5

104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136	137	138	139	140	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150	151	152	153	154	155	156	157	158	159	160	161	162	163	164	165	166	167	168	169	170	171	172	173	174	175	176	177	178	179	180	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190	191	192	193	194	195	196	197	198	199	200	201	202	203	204	205	206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	218	219	220	221	222	223	224	225	226	227	228	229	230	231	232	233	234	235	236	237	238	239	240	241	242	243	244	245	246	247	248	249	250	251	252	253	254	255	256	257	258	259	260	261	262	263	264	265	266	267	268	269	270	271	272	273	274	275	276	277	278	279	280	281	282	283	284	285	286	287	288	289	290	291	292	293	294	295	296	297	298	299	300	301	302	303	304	305	306	307	308	309	310	311	312	313	314	315	316	317	318	319	320	321	322	323	324	325	326	327	328	329	330	331	332	333	334	335	336	337	338	339	340	341	342	343	344	345	346	347	348	349	350	351	352	353	354	355	356	357	358	359	360	361	362	363	364	365	366	367	368	369	370	371	372	373	374	375	376	377	378	379	380	381	382	383	384	385	386	387	388	389	390	391	392	393	394	395	396	397	398	399	400	401	402	403	404	405	406	407	408	409	410	411	412	413	414	415	416	417	418	419	420	421	422	423	424	425	426	427	428	429	430	431	432	433	434	435	436	437	438	439	440	441	442	443	444	445	446	447	448	449	450	451	452	453	454	455	456	457	458	459	460	461	462	463	464	465	466	467	468	469	470	471	472	473	474	475	476	477	478	479	480	481	482	483	484	485	486	487	488	489	490	491	492	493	494	495	496	497	498	499	500	501	502	503	504	505	506	507	508	509	510	511	512	513	514	515	516	517	518	519	520	521	522	523	524	525	526	527	528	529	530	531	532	533	534	535	536	537	538	539	540	541	542	543	544	545	546	547	548	549	550	551	552	553	554	555	556	557	558	559	560	561	562	563	564	565	566	567	568	569	570	571	572	573	574	575	576	577	578	579	580	581	582	583	584	585	586	587	588	589	590	591	592	593	594	595	596	597	598	599	600	601	602	603	604	605	606	607	608	609	610	611	612	613	614	615	616	617	618	619	620	621	622	623	624	625	626	627	628	629	630	631	632	633	634	635	636	637	638	639	640	641	642	643	644	645	646	647	648	649	650	651	652	653	654	655	656	657	658	659	660	661	662	663	664	665	666	667	668	669	670	671	672	673	674	675	676	677	678	679	680	681	682	683	684	685	686	687	688	689	690	691	692	693	694	695	696	697	698	699	700	701	702	703	704	705	706	707	708	709	710	711	712	713	714	715	716	717	718	719	720	721	722	723	724	725	726	727	728	729	730	731	732	733	734	735	736	737	738	739	740	741	742	743	744	745	746	747	748	749	750	751	752	753	754	755	756	757	758	759	760	761	762	763	764	765	766	767	768	769	770	771	772	773	774	775	776	777	778	779	780	781	782	783	784	785	786	787	788	789	790	791	792	793	794	795	796	797	798	799	800	801	802	803	804	805	806	807	808	809	810	811	812	813	814	815	816	817	818	819	820	821	822	823	824	825	826	827	828	829	830	831	832	833	834	835	836	837	838	839	840	841	842	843	844	845	846	847	848	849	850	851	852	853	854	855	856	857	858	859	860	861	862	863	864	865	866	867	868	869	870	871	872	873	874	875	876	877	878	879	880	881	882	883	884	885	886	887	888	889	890	891	892	893	894	895	896	897	898	899	900	901	902	903	904	905	906	907	908	909	910	911	912	913	914	915	916	917	918	919	920	921	922	923	924	925	926	927	928	929	930	931	932	933	934	935	936	937	938	939	940	941	942	943	944	945	946	947	948	949	950	951	952	953	954	955	956	957	958	959	960	961	962	963	964	965	966	967	968	969	970	971	972	973	974	975	976	977	978	979	980	981	982	983	984	985	986	987	988	989	990	991	992	993	994	995	996	997	998	999	1000
1	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	1000000000	100000																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																								

[図13]



[図14]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2023/000135

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER**G01N 27/62**(2021.01)i

FI: G01N27/62 Y

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G01N27/60-27/70; G01N30/00-30/96; G01N33/48-33/98; H01J49/00-49/48

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2023
 Registered utility model specifications of Japan 1996-2023
 Published registered utility model applications of Japan 1994-2023

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2022/162999 A1 (SHIMADZU CORPORATION) 04 August 2022 (2022-08-04) paragraphs [0014]-[0032], fig. 1, 2	11-20
Y		1-10
Y	JP 2011-85484 A (HITACHI, LTD.) 28 April 2011 (2011-04-28) paragraphs [0018], [0029], [0037], fig. 1, 4	1-10
A	WO 2020/100182 A1 (SHIMADZU CORPORATION) 22 May 2020 (2020-05-22)	1-20
A	WO 2007/102201 A1 (SHIMADZU CORPORATION) 13 September 2007 (2007-09-13)	1-20
A	JP 2013-224858 A (SHIMADZU CORPORATION) 31 October 2013 (2013-10-31)	1-20
A	WO 2018/008149 A1 (SHIMADZU CORPORATION) 11 January 2018 (2018-01-11)	1-20

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
 “E” earlier application or patent but published on or after the international filing date
 “L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
 “O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
 “P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
 “X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
 “Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
 “&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

01 March 2023

Date of mailing of the international search report

14 March 2023

Name and mailing address of the ISA/JP

Japan Patent Office (ISA/JP)
3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2023/000135

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO 2020/188814 A1 (SHIMADZU CORPORATION) 24 September 2020 (2020-09-24) paragraph [0058], fig. 10	1-20

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2023/000135

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO	2022/162999	A1	04 August 2022	(Family: none)	
JP	2011-85484	A	28 April 2011	US 2011/0093214 A1 paragraphs [0035], [0046], [0054], fig. 1, 4	
WO	2020/100182	A1	22 May 2020	(Family: none)	
WO	2007/102201	A1	13 September 2007	US	2009/0008542 A1
				EP	1995593 A1
				CN	101400995 A
JP	2013-224858	A	31 October 2013	US	8916818 B2
				CN	103376301 A
WO	2018/008149	A1	11 January 2018	US	2020/0309748 A1
				EP	3483600 A1
				CN	109477814 A
WO	2020/188814	A1	24 September 2020	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G01N 27/62(2021.01)i FI: G01N27/62 Y														
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G01N27/60-27/70; G01N30/00-30/96; G01N33/48-33/98; H01J49/00-49/48 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922-1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971-2023年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996-2023年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994-2023年</td> </tr> </table> 国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）			日本国実用新案公報	1922-1996年	日本国公開実用新案公報	1971-2023年	日本国実用新案登録公報	1996-2023年	日本国登録実用新案公報	1994-2023年				
日本国実用新案公報	1922-1996年													
日本国公開実用新案公報	1971-2023年													
日本国実用新案登録公報	1996-2023年													
日本国登録実用新案公報	1994-2023年													
C. 関連すると認められる文献														
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号												
X	WO 2022/162999 A1（株式会社島津製作所）04.08.2022（2022-08-04） [0014]-[0032], 図1, 2	11-20												
Y		1-10												
Y	JP 2011-85484 A（株式会社日立製作所）28.04.2011（2011-04-28） [0018][0029][0037], 図1, 4	1-10												
A	WO 2020/100182 A1（株式会社島津製作所）22.05.2020（2020-05-22）	1-20												
A	WO 2007/102201 A1（株式会社島津製作所）13.09.2007（2007-09-13）	1-20												
A	JP 2013-224858 A（株式会社島津製作所）31.10.2013（2013-10-31）	1-20												
A	WO 2018/008149 A1（株式会社島津製作所）11.01.2018（2018-01-11）	1-20												
A	WO 2020/188814 A1（株式会社島津製作所）24.09.2020（2020-09-24） [0058], 図10	1-20												
☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。														
<table border="0"> <tr> <td>* 引用文献のカテゴリー</td> <td>“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの</td> </tr> <tr> <td>“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの</td> <td>“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの</td> </tr> <tr> <td>“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの</td> <td>“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの</td> </tr> <tr> <td>“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）</td> <td>“&” 同一パテントファミリー文献</td> </tr> <tr> <td>“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</td> <td></td> </tr> <tr> <td>“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献</td> <td></td> </tr> </table>			* 引用文献のカテゴリー	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの	“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの	“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの	“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの	“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの	“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）	“&” 同一パテントファミリー文献	“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献		“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献	
* 引用文献のカテゴリー	“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの													
“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの	“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの													
“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの	“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの													
“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）	“&” 同一パテントファミリー文献													
“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献														
“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献														
国際調査を完了した日 01.03.2023	国際調査報告の発送日 14.03.2023													
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官） 伊藤 裕美 2W 9515 電話番号 03-3581-1101 内線 3258													

国際調査報告
 パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2023/000135

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO	2022/162999	A1	04.08.2022	(ファミリーなし)	
JP	2011-85484	A	28.04.2011	US 2011/0093214	A1
				[0035][0046]	
				[0054], Figs. 1, 4	
WO	2020/100182	A1	22.05.2020	(ファミリーなし)	
WO	2007/102201	A1	13.09.2007	US 2009/0008542	A1
				EP 1995593	A1
				CN 101400995	A
JP	2013-224858	A	31.10.2013	US 8916818	B2
				CN 103376301	A
WO	2018/008149	A1	11.01.2018	US 2020/0309748	A1
				EP 3483600	A1
				CN 109477814	A
WO	2020/188814	A1	24.09.2020	(ファミリーなし)	