

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第5315025号  
(P5315025)

(45) 発行日 平成25年10月16日(2013.10.16)

(24) 登録日 平成25年7月12日(2013.7.12)

(51) Int.Cl.	F I
GO 1 N 30/86 (2006.01)	GO 1 N 30/86 D
GO 1 N 21/27 (2006.01)	GO 1 N 21/27 Z
GO 1 N 30/88 (2006.01)	GO 1 N 30/88 J
GO 1 N 30/74 (2006.01)	GO 1 N 30/88 B
GO 1 N 30/72 (2006.01)	GO 1 N 30/74 F

請求項の数 18 (全 13 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2008-303373 (P2008-303373)	(73) 特許権者	501387839
(22) 出願日	平成20年11月28日(2008.11.28)		株式会社日立ハイテクノロジーズ
(65) 公開番号	特開2009-150876 (P2009-150876A)		東京都港区西新橋一丁目2 4 番 1 4 号
(43) 公開日	平成21年7月9日(2009.7.9)	(74) 代理人	100100310
審査請求日	平成23年2月4日(2011.2.4)		弁理士 井上 学
(31) 優先権主張番号	特願2007-309638 (P2007-309638)	(74) 代理人	100098660
(32) 優先日	平成19年11月30日(2007.11.30)		弁理士 戸田 裕二
(33) 優先権主張国	日本国(JP)	(72) 発明者	和田 宏之
			茨城県ひたちなか市大字市毛8 8 2 番地
			株式会社 日立ハイ
			テクノロジーズ 那珂事業所内
		(72) 発明者	石井 公彦
			茨城県ひたちなか市大字市毛8 8 2 番地
			株式会社 日立ハイ
			テクノロジーズ 那珂事業所内
			最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 スペクトル解析および表示

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

化学物質を含む試料を分析し、分析結果をスペクトルとして表示する表示部を備えた分析装置において、

前記表示部は、

前記化学物質の定性情報と、前記化学物質を含む試料を識別するための情報と、からなる二次元のグラフ上に、

前記化学物質の定量情報を、色、または階調、または等高線のいずれかを用いて重畳的に表示することを特徴とする分析装置。

【請求項 2】

請求項 1 記載の分析装置において、

前記化学物質は、

タンパク質、またはペプチド、またはビタミン、または金属イオン、または高分子の少なくとも 1 つであることを特徴とする分析装置。

【請求項 3】

請求項 1 記載の分析装置において、

前記定性情報は、

前記化学物質の属性であり、

分析時間、光の波長、質量対電荷比の少なくとも 1 つであることを特徴とする分析装置

## 【請求項 4】

請求項 1 記載の分析装置において、  
前記定量情報は、  
前記化学物質の量であり、  
信号強度であることを特徴とする分析装置。

## 【請求項 5】

請求項 1 記載の分析装置において、  
前記化学物質を含む試料を識別するための情報は、  
前記分析が行われた順番を示す分析データナンバー、日付、前記試料の名前、前記試料の番号、前記試料の濃度、装置設定条件の少なくとも 1 つであることを特徴とする分析装置。

10

## 【請求項 6】

請求項 1 記載の分析装置において、  
前記分析装置は、  
液体クロマトグラフ分析装置、またはアミノ酸分析装置、または分光分析装置、または分光蛍光光度計、または原子吸収分析装置、または発光分光分析装置、またはガスクロマトグラフ装置、または質量分析装置であることを特徴とする分析装置。

## 【請求項 7】

請求項 1 記載の分析装置において、  
任意のスペクトルを選択する入力部を有し、  
前記表示部は、  
前記入力部により選択された個別のスペクトルを表示することを特徴とする分析装置。

20

## 【請求項 8】

請求項 1 記載の分析装置において、  
前記スペクトルのピークの保持時間、または面積、または高さに基づいて、  
前記スペクトルに異常があるか否かを判定することを特徴とする分析装置。

## 【請求項 9】

化学物質を含む試料を分析し、分析結果をスペクトルとして表示する分析装置において、  
前記化学物質の定性情報と、前記化学物質を含む試料を識別するための情報と、からなる二次元のグラフ上に、  
前記化学物質の定量情報を、色、または階調、または等高線のいずれかをを用いて重畳的に表示する表示部と、  
前記スペクトルのベースラインの変動を補正するデータ処理部、を有し、  
前記表示部は、  
前記データ処理部による補正結果に基づいて、  
前記スペクトルを表示することを特徴とする分析装置。

30

## 【請求項 10】

請求項 9 記載の分析装置において、  
任意のスペクトルを選択する入力部を有し、  
前記データ処理部は、当該選択されたスペクトルのベースラインの変動を補正した場合に、前記補正結果に基づいて、さらに他のスペクトルのベースラインを補正し、  
前記表示部は、  
前記選択されたスペクトルのベースラインの変動の補正結果、及び前記他のスペクトルのベースラインの補正結果に基づいて、  
前記スペクトルを表示することを特徴とする分析装置。

40

## 【請求項 11】

請求項 10 記載の分析装置において、  
前記表示部は、  
前記入力部によって、  
前記化学物質の定量情報に関する範囲が入力された場合には、

50

当該入力された範囲のスペクトルを表示することを特徴とする分析装置。

【請求項 1 2】

請求項 1 0 記載の分析装置において、

前記表示部は、

前記入力部によって、

前記化学物質の定性情報、前記化学物質の定量情報、前記化学物質を含む試料を識別するための情報または分析条件のうち、少なくともいずれか一つに関する範囲が入力された場合には、

当該入力された範囲に基づいて、前記スペクトルを拡大表示または縮小表示することを特徴とする分析装置。

10

【請求項 1 3】

請求項 1 0 記載の分析装置において、

前記入力部はスクロール部を有し、

前記スクロール部のスクロールに基づいて、前記表示部に表示されたスペクトルの信号強度の分解能を変更できることを特徴とする分析装置。

【請求項 1 4】

請求項 1 1 記載の分析装置において、

前記データ処理部は、

前記入力部によって前記化学物質の定量情報に関する範囲内における閾値が入力された場合には、

前記範囲内におけるスペクトルについてのベースラインとピークとを判定することを特徴とする分析装置。

20

【請求項 1 5】

化学物質を含む試料を分析し、分析結果をスペクトルとして表示する表示装置において

、前記化学物質の定性情報と、前記化学物質を含む試料を識別するための情報と、からなる二次元のグラフ上に、

前記化学物質の定量情報を、色、または階調、または等高線のいずれかを用いて重畳的に表示することを特徴とする分析装置。

【請求項 1 6】

化学物質を含む試料を分析し、分析結果をスペクトルとして表示する分析装置を用いた分析方法において、

少なくとも 1 つ以上のスペクトルを、

前記化学物質の定性情報と、

前記定性情報に対応した前記化学物質の定量情報を色もしくは階調で二次元表示、または等高線を用いて三次元表示するグラフを、

前記化学物質を含む試料を識別するための情報ごとに、配列して表示するステップを有することを特徴とする分析方法。

30

【請求項 1 7】

化学物質を含む試料を分析し、分析結果をスペクトルとして表示する分析装置を用いた分析方法において、

前記化学物質の定性情報と、前記化学物質を含む試料を識別するための情報と、からなる二次元のグラフ上に、

前記化学物質の定量情報を、色、または階調、または等高線のいずれかを用いて重畳的に表示するステップと、

前記スペクトルのベースラインの変動を補正するステップと、

前記補正結果に基づいて、前記スペクトルを表示するステップと、を有することを特徴とする分析方法。

40

【請求項 1 8】

50

化学物質を含む試料を分析し、分析結果をスペクトルとして表示する表示装置を用いた表示方法において、

前記化学物質の定性情報と、前記化学物質を含む試料を識別するための情報と、からなる二次元のグラフ上に、

前記化学物質の定量情報を、色、または階調、または等高線のいずれかを用いて重畳的に表示するステップを有し、

前記化学物質を含む試料を識別するための情報は、並び替えて表示できることを特徴とする表示方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

10

【0001】

本発明は、化学物質を分析する装置における、スペクトルの解析結果を表示する機能を備えたデータ解析装置に関する。

【背景技術】

【0002】

従来から複数のクロマトグラムを重ねて表示する方法、もしくは信号強度を上下にシフトして並べて表示する方法（図1）がある。上記従来技術の重ねて表示する方法では、多くとも10回分程度の測定データのクロマトグラムを表示すると線が重なってしまい、非常に煩雑な表示となる点には配慮がされておらず、これ以上の数の分析である場合についても配慮がされていなかった。また、上下にシフトして表示する方法では分析数が多いた

20

【0003】

クロマトグラムの表示方法として、特開2006-153628号公報に記載された“分析データ管理装置及び分析データ管理プログラム”が提案されている。これは複数の分析結果を複数のクロマトグラムを並べて表示し、目視確認できることが述べられている。

【0004】

また、3次元グラフの表示方法に関しては、ダイオードアレイ検出器（DAD）検出器もしくはフォトダイオードアレイ検出器（PDA）検出器のデータ解析にあるように、1分析を波長、時間、信号強度とを等高線形式の3次元グラフがある。上記従来技術は1分析での複数の波長の情報を表示できる利点があるが、複数の測定データのクロマトグラムを同じグラフ上に表示する点について考慮がされておらず、個別の測定データ毎にグラフを表示するために、複数のクロマトグラムを表示できない点についても配慮がなされていなかった。

30

【0005】

【特許文献1】2006-153628号公報

【発明の開示】

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

近年、液体クロマトグラフの高速分析化に伴い、分析時間の短縮化が可能になった。例えば、これまで10分程度の分析サイクル時間が必要だった分析が、1分以内の分析サイクル時間になってきている。データを確認する方法としては、解析された複数分析の結果の数値は表として確認する方法があるが、クロマトグラムを確認できない。これまで分析者は測定したクロマトグラムを1分析毎に確認して、目的サンプルのピークや、目的サンプル以外のピーク、例えば不純物によるピークがないかを確認、意図していない異常な現象がないかの確認を行っていた。

40

【0007】

しかし、高速化によって分析結果が増加することにより、クロマトグラムを1分析毎に確認する時間が膨大になってしまう。つまり、分析時間よりも解析時間の方が大きな割合を占めてきていることから、いかに大量のデータを簡単に解析できるかという課題が生じ

50

てきた。

【課題を解決するための手段】

【0008】

本発明の1つの側面は、少なくとも1つ以上のスペクトルを、化学物質の定性情報を第一の軸、化学物質の定量情報を第二の軸、試料を識別するための情報を第三の軸として、第三の軸上に順番に並べて、三次元表示することにある。

【0009】

本発明の他の側面は、前記第一の軸、および前記第二の軸、および前記第三の軸は交差していることにある。

【0010】

また、本発明の他の側面は、スペクトルのベースラインの変動を補正し、補正結果に基づいて、三次元表示することにある。

【発明の効果】

【0011】

本発明によれば、分析結果に目的試料のピークの保持時間や信号強度に異常があるかどうか、未知試料が含まれているかどうか、を一目で確認することができる。

【発明を実施するための最良の形態】

【0012】

以下、図2～図4を用いて、本発明の一実施形態による情報処理装置の構成について説明する。最初に、図2を用いて、本実施形態による情報処理装置を含む分析システムの構成について説明する。図2は、本発明の一実施形態による情報処理装置を含む分析システムの構成を示すブロック図である。

【0013】

情報処理装置10は、情報処理部12と、分析機器制御部14と、情報保存部16とを備えている。情報処理部12は、分析装置部20から得られた分析情報を収集する情報収集部17や、分析情報を再解析するためのグラフ作成部18と、を備えている。分析機器制御部14は、分析装置部20の動作を制御する。情報保存部16は、分析機器制御部14から得られた分析情報や、情報処理部12から得られた解析情報や、分析装置部20を分析機器制御部14で制御するための条件を、記録保存する。

【実施例1】

【0014】

実施例1として、高速液体クロマトグラフに適用した例について説明する。分析装置部20は、溶離液を送液するポンプ22と、試料を流路に導入するためのオートサンプラ24と、分析するためのカラムを恒温するカラムオープン26と、カラムで分離された成分を検出する検出器28とが含まれる。

【0015】

また、入力部30は、キーボードやマウス等の入力手段であり、分析機器制御部14や情報処理部12に対して、操作指示を入力できる。表示部32は、ディスプレイであり、情報処理部12による処理結果や入力部30からの入力情報が表示される。

【0016】

次に、測定中のリアルタイム表示での操作手順及び表示手法を示す。この時のフローチャートを図6に示す。

【0017】

ユーザがコンピュータ上で分析アプリケーションを起動する。図3に本実施形態の分析アプリケーションのウィンドウを示す。

【0018】

このウィンドウでは、化学物質の定性情報を第一の軸、化学物質の定量情報を第二の軸、試料を識別するための情報を第三の軸として表示する。

【0019】

ここで、化学物質とは、タンパク質・ペプチド・ビタミン等の有機物、金属イオン等の

10

20

30

40

50

無機物，高分子等である。

【 0 0 2 0 】

また、化学物質を含んだ試料を識別するための情報とは、分析が行われた順番を示す分析データナンバー・日付・試料の名前・試料の番号・試料の濃度・メソッド情報等である。メソッド情報とは、装置に設定する条件であり、ポンプでは流速・グラジエント条件・移動相の種類（pH，塩の違いも含む）、サンプラーではサンプルNo.・サンプル名・注入量・洗浄液の種類、オープンでは温度、カラムでは種類・長さ・製造ロット、検出器では波長・レスポンス・収集間隔等の設定情報である。

【 0 0 2 1 】

そして、定性情報とは、化学物質の属性を表す情報、例えば分析時間であり、定量情報とは、化学物質の量を表す情報、例えば信号強度である。

10

【 0 0 2 2 】

本実施例では、選択された分析データを、図3に示すように、分析データナンバーを縦軸として、分析時間を横軸として、信号強度を、強度の強弱により色もしくは階調で表示する機能を備えている。

【 0 0 2 3 】

なお、分析データは等高線表示等を用いて立体的に表示してもよい。

【 0 0 2 4 】

(S1) 情報処理装置10からの制御で分析装置部20の測定を開始する。情報処理部12により測定を開始し、測定結果をリアルタイムで処理し、以下の手順に従いクロマトグラムおよび3次元表示をする。

20

【 0 0 2 5 】

(S2) 情報収集部17により分析データを収集し、情報保存部16に保存された分析データの中で、情報処理部12により信号強度の最小値と最大値を算出し、(S3) 自動で色もしくは濃淡の強弱を最適化し、グラフ作成部18により目盛を表示する。ピークトップのみを色もしくは濃淡の強弱で表示してもよい。

【 0 0 2 6 】

ユーザにより入力部30からマニュアルで信号強度の範囲の最大値，最小値，目盛等を変更することができる。マウスのポインタを使い、任意の範囲を選択することで分析データを絞ることが可能であり、表示する時間の範囲を小さくすることが可能であり、任意の複数分析データをより詳細に確認することができる。

30

【 0 0 2 7 】

入力部30の一例としてマウスのスクロールを使い、信号強度の表示最大値を変更することで表示の分解能の設定を変更でき、微小なピークを表示することが可能である。信号強度の最小値としてもよい。

【 0 0 2 8 】

また、上記のマウスによる表示方法はPCの処理能力に左右されるため、ユーザの所有するPCによっては、処理速度が遅くなり不要である場合があるので、ユーザによりこの機能を有効にするかどうかの設定を決めることでもよい。複数の測定済みの測定結果がある場合は、S1およびS2により再処理し、再表示する。

40

【 0 0 2 9 】

(S4) 第1番目の測定はクロマトグラムおよび3次元表示を行う。第2番目の測定は、測定中の第2番目の測定結果をクロマトグラムで表示する。3次元表示には第1番目の結果および第2番目の処理されたところまでの結果を表示する。この時、第1番目の結果は3次元表示に自動的に残ることにより、過去の結果を選択し、開く作業の手間を省くことができる。3次元表示の第2番目を選択することでクロマトグラムを測定中の結果の表示から第2番目の結果に変更することができる。また従来の表示方法である2つ以上のクロマトグラムの重ね書きを行ってもよい。

【 0 0 3 0 】

第3番目以降も上記の第2番目の手順と同様に処理を行う。

50

## 【 0 0 3 1 】

( S 5 ) 移動相の吸光度が検出される条件では、しばしばクロマトグラムのベースラインが傾くことがある。この傾きよりも小さいサンプルのピークがある場合などは 3 次元表示をする場合は傾いたベースライン分をオフセットして表示させる必要がある。

## 【 0 0 3 2 】

オフセットさせるマニュアルの方法は、クロマトグラムの表示のベースラインを見ながら、xで示すように各変動開始ポイントを設定しながら、補助線を引く(図5)。これによって、算出できるオフセットの量を 3 次元表示に反映させる。これにより移動相の吸光度をキャンセルし、オフセット表示できる。このオフセットの設定をユーザにより残りの全ての分析データへの適用、もしくは任意の分析データへの適用を選択することでもよい。

10

## 【 0 0 3 3 】

オフセットさせるオートの方法は、分析データに含まれるグラジエント条件設定およびグラジエントの遅れ時間の設定を自動で読み込みさせることで、ベースライン分をオフセットする条件を自動で決定する。これはミキサ、配管等の容量によるグラジエントの遅れとグラジエント条件による移動相の混合比からベースラインが算出できることを利用する。さらに上記のマニュアルの方法により補正してもよい。

## 【 0 0 3 4 】

( S 6 ) 設定した分析が残っている場合は、( S 1 ) 測定に戻る。ユーザにより任意の分析データを選択するには、分析データの表示をハイライトする、もしくはチェックボックスにチェックマークを付ける。選択された分析データは 3 次元表示とは別の画面に個別にクロマトグラムを表示可能とする。複数選択された場合には、重ね書きされたクロマトグラムを表示可能とする。

20

## 【 0 0 3 5 】

また分析データを複数選択した状態で、分析結果である信号強度の波形においてベースラインとサンプルのピークとを識別するための閾値を設定し、信号強度の波形処理を実行すると、選択された分析データのみを波形処理を行う。

## 【 0 0 3 6 】

3 次元表示の横のクロマトグラム画面には、任意の時間におけるピークの保持時間、面積値、高さを算出した結果を表として表示することができる。

30

## 【 0 0 3 7 】

また、表には未知の化合物によるピークの有無を示す。指定したピークの保持時間の範囲以外に、任意の面積値以上、もしくは高さ以上等の条件を指定することができ、未知であるかの判定を行うことが可能である。

## 【 0 0 3 8 】

また、目的ピークに対する未知ピークの占める割合を示すこともできる。ユーザ指定の割合以上である場合は、チェックマーク等の表示することも可能である(図4)。

## 【 0 0 3 9 】

マウスにより時間軸にあるカーソルを移動することで、クロマトグラム画面に各分析データに任意の時間での信号強度を示すことが可能であり、つまり任意の時間における各分析データの信号強度を比較することができる。

40

## 【 0 0 4 0 】

測定中の異常判定機能として、任意の設定された未知のピークが検知された場合、複数回の再測定を行う機能を設定する。複数回とは、ユーザにより回数を決定し、数値を入力する。異常判定機能を使用するかどうかは、選択できるようにチェックマークを表示させ、ユーザにより選択する。選択された場合、同じ条件にて指定の回数を再測定する。再測定のタイミングは、全ての測定終了後でもよいし、測定毎に判定した直後でもよく、ユーザにより設定できるものとする。

## 【 0 0 4 1 】

これにより、ユーザは異常なピークが未知の成分であるか、装置のトラブル等に起因し

50

たものであるかを判断することができる。未知の成分であれば、再現してピークが出てくる可能性が高いが、装置のトラブルであれば通常は再現良くトラブルが発生しないであろうから、再現しないはずである。従来、この作業はユーザが測定後に自ら設定し、再測定していたもので、手間と追加測定の待ち時間が発生している。

【 0 0 4 2 】

次に、再解析の表示での操作手順及び表示手法を示す。

【 0 0 4 3 】

ユーザが「3次元表示でデータを開く」を選択し、分析データを保存したフォルダから複数の分析データを選択する。選択後、実行を指定することで表示の画面に進む。

【 0 0 4 4 】

分析データを測定した流速の早い順番に並び替える場合、ユーザが「表示の並び替え」を選択すると、表示部32に「並び替える項目」を表示させる。「並び替える項目」には分析データナンバー・日付・試料の名前・試料の番号・試料の濃度・流速・グラジエント条件・移動相の種類・サンプルNo.・サンプル名・注入量・洗浄液の種類・温度、カラムの種類・カラムの長さ・カラムの製造ロット・波長・レスポンス・収集間隔がある。

【 0 0 4 5 】

ユーザが項目から「流速」を選択すると、情報処理部12は、情報保存部16から分析データに含まれる流速の数値を読み取り、流速の数値の大きい順に並び替えて、再表示させる。同じ流速の数値がある場合、デフォルトは測定日時順でもよいし、2番目に優先される項目を選択できるようにしてもよい。グラジエント条件は時間と移動相の混合比との設定値であるので、任意の時間における混合比順でもよいし、任意の混合比における時間順でもよい。例えば、1分後における混合比の高い順であったり、混合比90：10に達する時間の早い順である。軸に表示した「並び替える項目」以外の項目は、表示された分析データにカーソルを合わせることで測定条件を表示させてもよい。

【 0 0 4 6 】

本発明によるスペクトル表示の例として、液体クロマトグラフを利用している高速アミノ酸分析計では、1分析において複数のアミノ酸を溶出した時間（保持時間）により識別し（定性）、信号強度により定量し、複数サンプルをそれぞれ分析する。これを本発明に適用した場合は、複数の分析結果を同時に表示することにより特定のアミノ酸の有無を瞬時に確認することができ、さらに特定のサンプルでの突出して増加（もしくは減少）しているアミノ酸の確認が非常に容易にできる。

【 0 0 4 7 】

また高速アミノ酸分析計において、食品中のアミノ酸の解析において、メソッドのカラム温度・移動相中のエチルアルコール濃度・緩衝液のpHにおいて各条件の前後を検討した例を図7に示す。例えば、温度により保持時間が早くなる成分と遅くなる成分があり、かつ各成分が十分に分離される最適な温度を視覚的に見つけることができる。本発明により各条件の違いを全体的に把握することができる。これにより、各条件の最適条件を決定することができる。

【 0 0 4 8 】

本発明は、分光分析装置、分光蛍光光度計、原子吸光分析装置、発光分光分析装置、ガスクロマトグラフ、質量分析装置等のスペクトルを表示する分析機器においても、適用可能である。ここでは、信号強度を定量情報として第一の軸に、光の波長や質量対電荷比等を定性情報として第二の軸に、分析データナンバー・日付・試料の名前・試料の番号・試料の濃度・メソッド情報等を第三の軸に表示する。画面表示の2次元表示であれば、3軸の内の1軸を色もしくは濃淡で表す。

【 0 0 4 9 】

液体クロマトグラフ質量分析計（LC-MS）に適用する場合は、保持時間と質量対電荷比の2つの定性情報があるため、軸をさらにもう1つ軸が必要となる。そこで、3つの軸と残り1軸を色もしくは濃淡で表示する。例えば、質量対電荷比の定性情報として第一の軸に、保持時間の定性情報として第二の軸に、分析データナンバー・日付・試料の名前

10

20

30

40

50

・試料の番号・試料の濃度・メソッド情報等を第三の軸に、信号強度を定量情報として色もしくは濃淡で3次元表示する。

【0050】

本実施例の効果として、これらの分析結果を利用したロット管理においてロット間の成分の違いを一目で複数の測定データを確認でき、容易にロット間の差異を確認することができる。

【0051】

時間の経過に伴った分析結果の変化を確認する場合には、時間毎に並べて表示することで容易にこれらの変化を目視することができる。

【0052】

また、同一サンプルを複数測定した時の再現性を確認する際においても、微小なピークの発生や、その他には、検体数が多い測定においては、注目する成分のピークの確認や想定していない成分のピークの確認を容易に気づくことができる。

【0053】

さらに、多成分を含む生体試料において、ピークの多い複雑なクロマトグラムの経時変化を一目で確認することができる。

【0054】

また、メソッド情報の各設定で並び替えて表示することで、複数成分サンプルにおいて各ピークの全体の分離、分析に必要な測定時間を比較しながら各設定の前後を比較することでメソッドの開発に利用できる。例えば、メソッドの開発において、成分の分離をより良くし、分析時間をより短くする必要がある。ただし、分析は流速を上げると、分析時間を短くすることができるが、分離度が悪化する。分離度を良くするには流速を遅くする必要があるが、分析時間が長くなってしまう。また別の条件として、カラムオープンの温度を上げると、移動相の粘性が下がりカラムにかかる圧力を抑えることができるので流速を上げることができる。しかし、同時に温度によりサンプルによっては悪影響を与える可能性が増加する、また移動相の上限温度ある。このような相反する各条件の中で、全体を確認しながら最適なメソッドを決定する必要があるため、本発明により、最適な流速、最適なグラジエント、最適なカラムの温度、等の最適なメソッドを決定することができる。

【図面の簡単な説明】

【0055】

【図1】従来のデータ表示方法例を示す図である。

【図2】本発明の一実施形態によるデータ処理装置を含む分析システムの構成を示すブロック図である。

【図3】本発明の実施例の一覧を示す図（下段）であり、一覧から選択されたクロマトグラムの波形画像を示す図（上段）である。

【図4】本発明の実施例の一覧を示す図（左図）であり、未知ピークの有無を示す図（右図）である。

【図5】本発明の実施例のベースラインを補正し、3次元表示を示す図である。

【図6】本発明の実施例のフローチャートである。

【図7】本発明の実施例の食品中のアミノ酸の解析において、メソッドのカラム温度・移動相中のエチルアルコール濃度・緩衝液のpHにおいて各条件の前後を検討した例を示す図である。

【符号の説明】

【0056】

- 10 情報処理装置
- 12 情報処理部
- 14 分析機器制御部
- 16 情報保存部
- 17 情報収集部
- 18 グラフ作成部

10

20

30

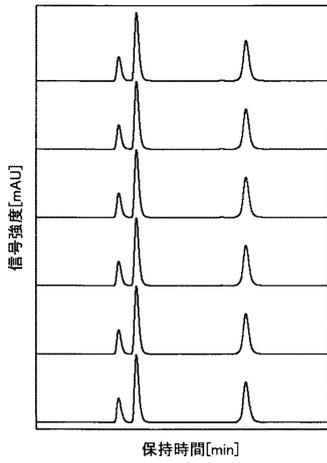
40

50

- 2 0 分析装置部
- 2 2 ポンプ
- 2 4 オートサンプラ
- 2 6 カラムオープン
- 2 8 検出器
- 3 0 入力部
- 3 2 表示部

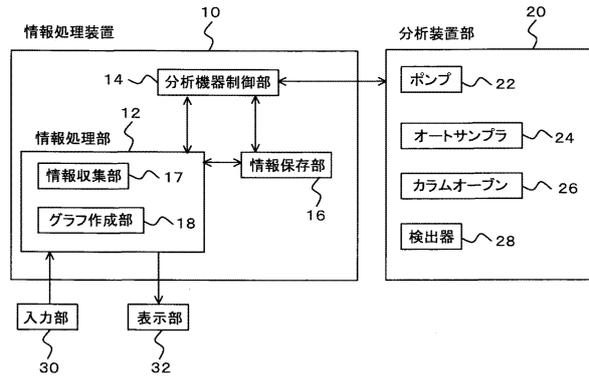
【図 1】

図 1

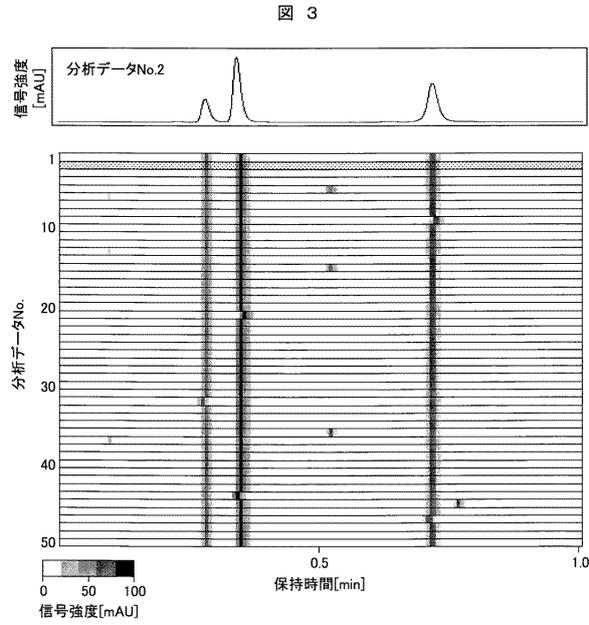


【図 2】

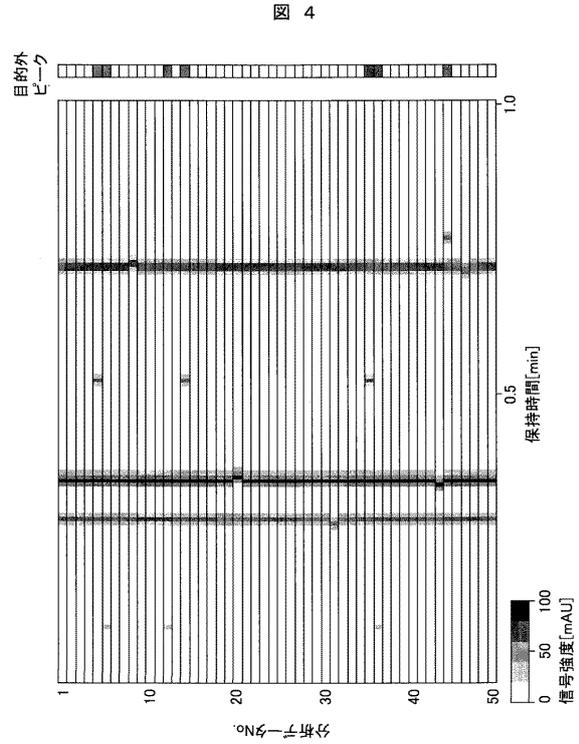
図 2



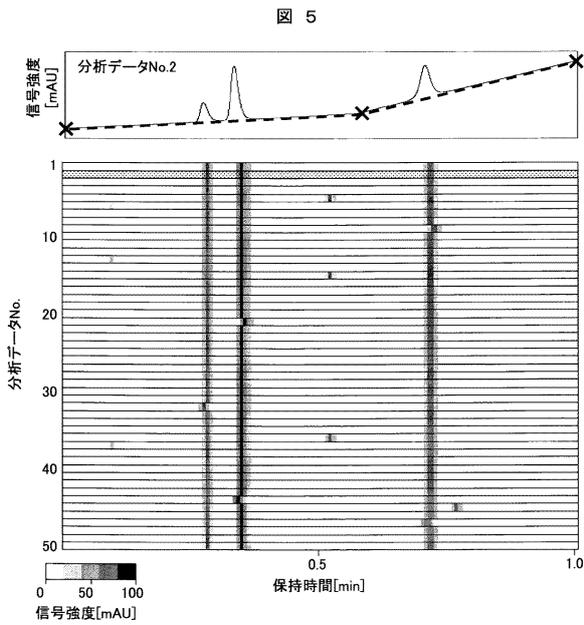
【 図 3 】



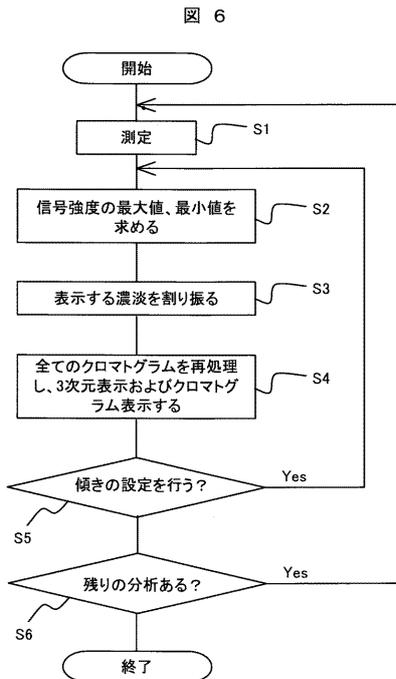
【 図 4 】



【 図 5 】

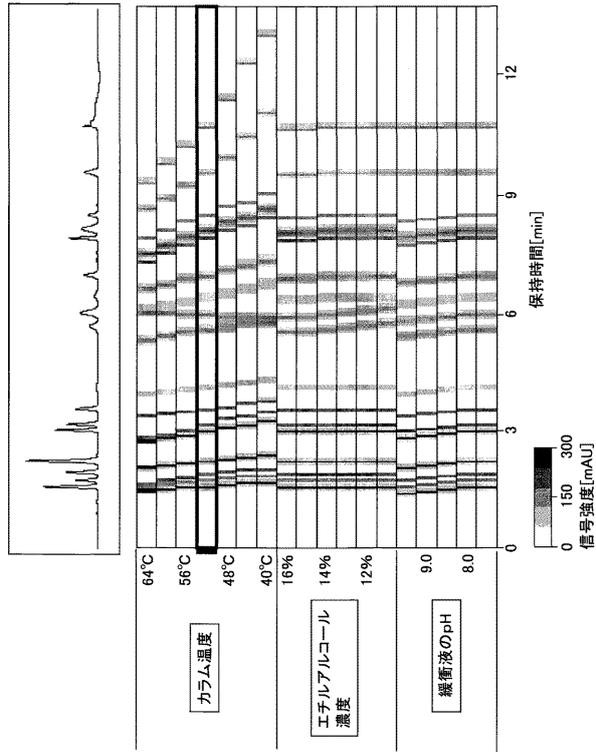


【 図 6 】



【 図 7 】

図 7



## フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I  
G 0 1 N 30/74 E  
G 0 1 N 30/72 A  
G 0 1 N 30/72 C

(72)発明者 伊藤 正人  
茨城県ひたちなか市大字市毛 8 8 2 番地  
ズ 那珂事業所内  
株式会社 日立ハイテクノロジー

審査官 柏木 一浩

(56)参考文献 特開 2 0 0 7 - 1 4 7 4 6 4 ( J P , A )  
特表 2 0 0 7 - 5 3 2 8 8 2 ( J P , A )  
特開 2 0 0 1 - 1 6 5 9 2 2 ( J P , A )  
特開 2 0 0 7 - 1 4 7 4 5 9 ( J P , A )  
特開 2 0 0 6 - 1 5 3 6 2 8 ( J P , A )  
特開 2 0 0 4 - 2 7 1 4 2 2 ( J P , A )

(58)調査した分野(Int.Cl. , D B 名)  
G 0 1 N 3 0 / 8 6  
G 0 1 N 2 1 / 2 7  
G 0 1 N 3 0 / 7 2  
G 0 1 N 3 0 / 7 4  
G 0 1 N 3 0 / 8 8