

受験番号:37IPC007

問1

未知のプロテオミクスおよびペプチド分析対象物の迅速なスクリーニングのために、内部のキャリブントによって最適な質量精度を保証することができる。ただし、キャリブントのピークによって分析対象物が不明瞭になる可能性、すなわち、分析対象物と混同される可能性が最小限になるようにキャリブントを設計すべきである。アミノ酸残基の平均組成をモデル化するために、「アベラジン(averagine)」という概念が提案された： $C_{4.9384}H_{7.7583}N_{1.3577}O_{1.4773}S_{0.0417}$ 。アベラジンの概念は、任意の公称質量に関連する最も一般的な質量欠陥を同定するツールとして用いることもできる。質量111.05431のアベラジンの場合、110.9981の公称質量と0.0562055の質量欠陥とから構成されている。キャリブントの設計を補助するために、「スカルシン(scarcine)」の概念を提案する。アベラジンが所与の公称質量(ペプチドなどの所与の化合物の集団)について最も一般的な質量欠陥を示すとすると、スカルシンは、所与の公称質量に対して最も一般的でない質量欠陥である。質量欠損キャリブントのターゲットをより適切に定義するために、すべてのペプチドの集団(MW0~2400)をその公称質量および質量欠陥に関してマッピングした(図5および図6を参照)。

問2

【0045】

本明細書に開示されているように、チップベースのミリフルイディクス、および関連するハンドヘルド装置は、管状のミリフルイディクスとは大きく異なる技術を提供しており、従来のマイクロフルイディクスに比べて、極小ナノクラスタの合成を制御する際のスループットの向上や、ナノ材料の成長を時間分解してマッピングするためのプローブとしての利点が示されている。これらの新規な研究の中心テーマは、一般的には金属構造の、また具体的には触媒の成長の化学性質を時間分解してマッピングするミリフルイディクスの有用性である。

【0046】

また、4-ニトロフェノールやフェリシアン化物の還元など、形成された金ナノ構造の連続流触媒作用も示されている。アルミナに含浸させた金ナノ粒子の、マイクロフルイディクスに基づく連続流触媒作用が従来からポリピリジン誘導体の合成に使用されており、連続流チャンネル内で埋め込み金ナノ構造触媒の寸法および形態を制御できることによって、優れた連続流触媒作用の応用が可能となっている。極めて精緻な触媒を埋め込むことができることで、これらのツールは、実用的な研究の観点からも基礎的な研究の観点からも触媒作用に革命をもたらす可能性がある。こうしたシステムは、バイオセンシング、電気泳動、高度な光学的検出の分野にも進歩をもたらす可能性がある。さらに、この形成プロセスで得られる花のような金の形態は、表面増強ラマン分光法、触媒作用、バイオイメージング、超疎水性コーティングでの用途がある。

問3

【0102】

図1aは、メンブランセルの構成およびカソードとアノードの間で電位を受けたときの各イオンの流れを示す図である。

【0103】

塩コンパートメントからの生成物の流れは、次いで、20°Cで動作するイミノニ酢酸(IDA)晶析装置に導かれた。これにより、固体IDA、可溶性イミノニ酢酸一ナトリウム(IDA)、および可溶性MSIDAを含む晶析装置の流れが得られた。得られた晶析装置の流れは、次いで、濾過システムに導かれ、固体IDAは分離、乾燥され、下流のグリホサート製造に使用された。可溶性IDAおよびMSIDAは濾過システムを出て再循環され、供給流と混合されて、2コンパートメントのバイポーラ膜電気透析プロセスに接触した。図2は、今回のイミノニ酢酸二ナトリウム(DSIDA)の変換および再循環のプロセス全体における2コンパートメントBMEプロセスを示している。

【0104】

プロセスを開始し、2コンパートメントのバイポーラ膜電気透析プロセスにおける供給組成物の供給源として、濾過システムを出た可溶性IDAおよびMSIDAを連続的に再循環させたとき、以下の測定値が得られた。

※「Figure la」は「Figure 1a」とみなして訳しました。

問4

【請求項1】

1つまたは複数の潜在的に有用な分子の組み合わせを同定する方法であって、

第1のセットの1つまたは複数の候補分子を同定するために、

対象化合物、前記対象化合物の仮想スキュフォールド分子、および化学合成方式に従って前記仮想スキュフォールド分子と反応する仮想反応物質断片のために、前記化学合成方式を提供する工程と、

前記仮想反応物質断片と前記仮想スキュフォールド分子の組み合わせを解析するために前記仮想反応物質断片および前記仮想スキュフォールド分子を準備する工程と、

生成物分子が前記仮想スキュフォールド分子および前記仮想反応物質断片から形成されうる場合に、残りのスキュフォールドサブセットおよび残りの断片サブセットを指定する工程と、

前記残りのスキュフォールドサブセットと前記残りの断片サブセットを結ぶ軸を中心に、前記残りの断片サブセットを5度以下ずつ増分しながら360度回転させる工程と、

立体衝突が検出されない各増分を潜在的な生成物増分として記録することと、

増分ごとに前記残りの断片サブセットと前記残りのスキュフォールドサブセットの間の離間距離を記録し、前記離間距離が所定の基準距離以下の生成物増分のセットを同定して、前記1つまたは複数の潜在的に有用な分子の組み合わせを同定することによって、

前記仮想反応物質断片と前記仮想スキヤフォールド分子の潜在的に有用な組み合わせを同定する工程と、を含む選択手順を対象化合物に適用するステップと、
組み合わせ断片のセットを前記第1のセットの1つまたは複数の候補から選択するステップと、
前記1つまたは複数の潜在的に有用な分子の組み合わせである、第2のセットの1つまたは複数の候補分子を同定するために、前記選択手順を前記組み合わせ断片のセットに適用するステップと
を含む、方法。