

★★★ <第37回知的財産翻訳検定試験【第18回英文和訳】> ★★★  
≪ 1 級課題 -化学->

【問 1】

[0007]

未知のプロテオミクス解析検体及びペプチドミクス解析検体の迅速なスクリーニングのためには、内部キャリブラントが最適な質量精度を確保できるが、キャリブラントピークが検体を不明瞭にしたり検体と間違えられる可能性が最小限になるように設計する必要がある。「アベラジン(averagine)」という概念が、アミノ酸残基の平均組成をモデル化するために提唱された( $C_{4.9384}H_{7.7583}N_{1.3577}O_{1.4773}S_{0.0417}$ )。アベラジンという概念は又、任意のノミナル質量に関して最も一般的な質量欠損を同定するツールとしても使用できる。このアベラジンが 111.05431 の質量の場合、それはノミナル質量 110.9981 及び質量欠損 0.0562055 から構成される。キャリブラントの設計を支援するために、我々は、「スカーシン(scarcine)」という概念を提案する。アベラジンが、(ペプチド等の化合物の所与の集合の)所与のノミナル質量のための最も一般的な質量欠損を示すとすれば、スカーシンは所与のノミナル質量のための最も一般的でない質量欠損である。

質量欠損キャリブラントのためのターゲットをより明確にするために、全てのペプチド集団 (MW 0~2400) のマッピングを、それらのノミナル質量及び質量欠損に関して行った (図 5 及び図 6 を参照)。

【問 2】

[0045]

本明細書に開示のチップベースのミリフルイディクスおよび関連する手で持てる大きさの装置は、よりハイスループットな超小型ナノクラスターの制御合成のために、また、ナノマテリアルの時間分解成長をマッピングするためのプローブとして、管状のミリフルイディクスとは大きく異なり、従来のマイクロフルイディクスに勝る実証済みの利点を備えた技術を提供する。これらの新たな研究の中心的テーマは、一般に金属構造、特に触媒の成長の時間分解化学をマッピングするためのミリフルイディクスの利用である。

[0046]

また、形成されたままの金ナノ構造の連続フロー触媒活性、例えば、4-ニトロフェノールおよびフェリシアン化物の還元の実証も提供される。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スペースの連続フロー触媒は、

これまで、ポリピリジン誘導体の合成に利用されてきたが、連続フローチャンネル内に埋め込まれた金ナノ構造触媒の寸法および形態を制御する能力は、優れた連続フロー触媒の応用を提供し得る。原子レベルで正確に触媒を埋め込む能力を備えたこれらのツールは、基礎研究だけでなく実用的な研究の観点からも触媒に革命を起こし得る。そのようなシステムは、バイオセンシング、電気泳動、および強化された光学検出の分野における進歩も導き得る。さらに、この形成プロセスを通じて得られる花様の金の形態は、表面増強ラマン分光法、触媒、バイオイメージング、および超疎水性コーティングに用途を有する。

### 【問 3】

[0102]

図 1a は、膜電池の構成、並びに、カソード及びアノードの間に電位を生じさせたときのそれぞれのイオンの流れを示す。

[0103]

塩室からの生成物流れは、次に、20℃で操作されるイミノ二酢酸 (IDA) 晶析器に向けられた。その結果、固体 IDA、可溶性イミノ二酢酸一ナトリウム (IDA)、及び可溶性 MSIDA を含む晶析器流れが発生した。発生した晶析器流れは次に、濾過システムに向かい、それにより固体 IDA が分離されて乾燥され、下流のグリホサート製造に使用された。濾過システムから出てきた可溶性 IDA 及び MSIDA は再循環され、供給流れと混合されて 2 室式バイポーラ膜電気透析プロセスに連通された。図 2 は、このイミノ二酢酸二ナトリウム (DSIDA) 変換及び再循環プロセスの全体的な状況における 2 室式 BME プロセスを示す。

[0104]

プロセスを開始して、濾過システムから出てきた可溶性 IDA 及び MSIDA を、2 室式バイポーラ膜電気透析プロセス用組成物の供給源として連続的に再循環したとき、下記の値が観察された：

### 【問 4】

【請求項 1】

1 つ以上の潜在的に有用な分子の組み合わせを同定するための方法であって、以下を含む方法：

1 つ以上の候補分子の第 1 のセットを同定するために、選択手順を目的の化合物に適用する工程であり、選択手順が以下を含む工程：

目的の化合物の化学合成スキーム、目的の化合物の仮想足場分子、および

化学合成スキームに従って仮想足場分子と反応する仮想反応物フラグメントを提供するステップ；

仮想反応物フラグメントと仮想足場分子との組み合わせを分析するために、仮想反応物フラグメントと仮想足場分子を準備するステップ；

仮想足場分子と仮想反応物フラグメントから生成物分子が形成され得る場合に、残存足場サブセットと残存フラグメントサブセットを指定するステップ；

残存足場サブセットと残存フラグメントサブセットとを接続する軸の周りに、残存フラグメントサブセットを5度以下の増分で360度まで回転させるステップ；ならびに

以下によって、仮想反応物フラグメントと仮想足場分子との潜在的に有用な組み合わせを同定するステップ；

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；および

1つ以上の潜在的に有用な分子の組み合わせを同定するために、各増分における残存フラグメントサブセットと残存足場サブセットとの間の分離距離を記録し、分離距離が所定の基準距離以下である生成物増分のセットを同定すること；

1つ以上の候補の第1のセットから組み合わせフラグメントのセットを同定する工程；ならびに

1つ以上の潜在的に有用な分子の組み合わせである1つ以上の候補分子の第2のセットを同定するために、選択手順を組み合わせフラグメントのセットに適用する工程。