(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国 际 局

(43) 国际公布日
2015 年 10 月 1 日 (01.10.2015)

WIPO | PCT

(10) 国际公布号
WO 2015/143963 A1

(51) 国际专利分类号:
G01N 30/86 (2006.01)

(21) 国际申请号: PCT/CN2015/072818

(22) 国际申请日: 2015 年 2 月 12 日 (12.02.2015)

(25) 申请语言: 中文

(26) 公布语言: 中文

(30) 优先权:
201410113885.6 2014 年 3 月 25 日 (25.03.2014) CN

(72) 发明人; 及
(71) 申请人: **张华俊 (ZHANG, Huajun)** [CN/CN]; 中国江苏省苏州市苏州工业园区独墅湖科教创新区林泉街 377 号公共学院三号楼 3 楼, Jiangsu 215123 (CN)。

(72) 发明人: **应宁 (YING, Ning)**; 中国江苏省苏州市苏州工业园区独墅湖科教创新区林泉街 377 号公共学院三号楼 3, Jiangsu 215123 (CN)。

(74) 代理人: **北京欣永瑞知识产权代理事务所（普通合伙） (BEIJING YOUNGRISE IP LAW FIRM)**; 中国北京市海淀区马甸东路 17 号金澳国际大厦 1503 室, Beijing 100088 (CN)。

(81) 指定国 (除另有指明，要求每一种可提供的国家保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, 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, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW。

(84) 指定国 (除另有指明，要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, 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)。

[见续页]

(54) **Title**: METHOD FOR ANALYZING MIXTURE COMPONENTS

(54) **发明名称**: 一种分析混合物成分的方法

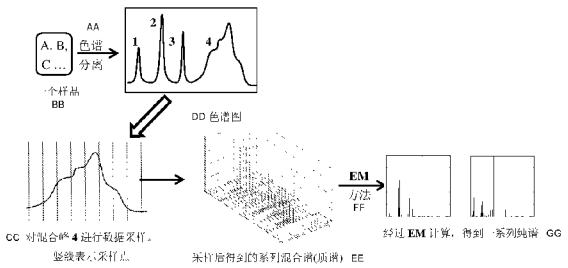


图 1 / FIG. 1

AA CHROMATOGRAPHIC SEPARATION
BB ONE SAMPLE
CC PERFORM DATA SAMPLING ON MIXED PEAK 4. VERTICAL LINES INDICATE SAMPLING POINTS
DD CHROMATOGRAM
EE SERIES OF MIXED SPECTRUMS (MASS SPECTRUMS) OBTAINED AFTER SAMPLING
FF EM METHOD
GG OBTAIN A SERIES OF PURE SPECTRUMS BY MEANS OF EM CALCULATION

(57) **Abstract**: A method for analyzing mixture components is provided, and comprises: (1) separating a mixture sample by using chromatographic technology, to obtain a preliminary chromatogram; (2) sampling as required any one interval in the preliminary chromatogram obtained in step (1), to obtain a series of spectrograms in different retention times, which are referred to as compound spectrograms; (3) performing calculation, by using a series of methods of an entropy minimum algorithm, in the mixture spectrograms obtained in step (2), to obtain each reconstructed pure spectrum and a corresponding pseudo concentration thereof. The method combines the chromatographic technology and the entropy minimum algorithm, and overcomes dependence on component separation in an existing analysis method, making separation not important any more. There is no need to completely separate each component in the mixture. Meanwhile, a prerequisite for using the entropy minimum algorithm is met. The method is universal, fast, and highly efficient, requires low costs, does not have high requirements on personnel, and has a great application prospect.

(57) **摘要**:

[见续页]

WO 2015/143963 A1

根据细则 4.17 的声明:

— 关于发明人身份(细则 4.17(i))

— 发明人资格(细则 4.17(iv))

本国际公布:

— 包括国际检索报告(条约第 21 条(3))。

提供一种分析混合物成分的方法，包括：（1）将混合物样品利用色谱技术进行分离，得到初步的色谱图；（2）对步骤（1）得到的初步的色谱图中的任意一个区间，根据需要进行采样，得到一系列在不同保留时间的谱图，称之为化合物谱图；（3）利用熵最小算法的系列方法，从步骤（2）得到的混合物谱图中，计算得到各重建纯谱及其对应的伪浓度。该方法将色谱技术和熵最小算法结合，克服了现有分析方法对成分分离的依赖，使得分离不再重要；不需要彻底地分离混合物中各个成分，同时也达到了熵最小算法使用的先决条件；并且该方法通用、速度快、高效、成本低，对人员要求不高，具有巨大的应用前景。