COMMENTARY

用語「分子量関連イオン molecular-related ion」の使用について

A Deprecated Term “Molecular-Related Ion”

吉野健一

Ken-ichi YOSHINO

神戸大学・バイオシグナル研究センター Biosignal Research Center, Kobe University, Kobe, JAPAN

(Received September 13, 2006; Accepted September 29, 2006)

【質問】「マスマスベクトロメトリー関係用語集（第2版）」に「molecular-related ion: 分子量関連イオン」という用語が収録されています。国外の研究者の論文では見かけませんが、国際的に通用する用語なのでしょうか？

【回答】

「Molecular-related ion 分子量関連イオン」は国際的に通用する用語ではありません。たとえ英語で表記しても理解されることはないと思います。国際的な認知度が低いことに加え、それぞれ定義の異なる「質量」と「分子量」、「モノアイソトピック質量」と「平均質量」とが混同された造語になっており、測定値が何の数量であるのかが不明瞭です。ですので日本語としても**使用しないことをお勧めします**。確かに日本質量分析学会が発行している「マスマスベクトロメトリー関係用語集（第2版）」に収録されていますが、本用語集は現在改訂作業を進めており、次の改訂版（第3版）において、この「molecular-related ion 分子量関連イオン」は、使用しないよう勧告する非推奨用語リストに加えられる予定です。

現在「molecular-related ion 分子量関連イオン」に代わる用語はありませんので、**特定のイオン種を呼称する場合は、「分子イオン」や「プロトン付加分子」、「脱プロトン分子」、「ナトリウムイオン付加分子」など、具体的なイオンを特定する用語を正しく使用することをお勧めします**。

分子量に近似する平均質量の値は、「分子量関連イオン」から与えられるモノアイソトピック質量の値とは異なります。また分子量は国際純正・応用化学連合 (International Union of Pure and Applied Chemistry: IUPAC) が推奨する標準原子量に基づいて計算された値であり、測定できる量、物理量ではありません。マスマスペクトル上の m/z 値から換算したイオンの質量は物理量であり、質量と分子量とは概念的には異なる数量です。質量分析によって分子の平

均質量を測定することはできますが、定義上、分子量は測定することができる数量ではありません。「分子量関連イオン」という表記では、結果的に m/z 値と分子量とを関連づけていることになり、質量分析によって分子量を測定できることを暗示させてしまい、誤解を生む恐れがあります。

この用語は、分子イオンやプロトン付加分子、脱プロトン分子、ナトリウムイオン付加分子など、分子が断片化することなくイオン化し、試料分子全体の質量データ、多くの場合はモノアイソトピック質量のデータを得ることが可能なイオン種の総称として定義された言葉です。確かに総称としての利便性は認められます。国内での使用例もまれではありません。しかし、英語表記の文法的な問題もあることから、国際的にはほとんど使用されていません。

分子が断片化することなくイオン化したイオン種に対しては、分子イオンを除いて、過去に「擬分子イオン (pseudo-molecular ion または quasi-molecular ion)」という用語が使用されていました。この用語は、対象が不明瞭であり、「擬分子」という表記が科学的ではなかったもので、IUPAC などから使用しないよう勧告されました。「分子量関連イオン」は、こうした背景のもとで、元来の「擬分子イオン」の用語の意味を超え、分子イオンを包括した形で、「擬分子イオン」に代わる用語として考案されたものと思われます。言うまでもなく、「分子量関連イオン」の代用として「擬分子イオン」を用いることはできません。