COMMENTARY

用語「プロトン化分子イオン」の誤用について

The Incorrect Term “Protonated Molecular Ion”

吉野健一^{1, 2}Ken-ichi YOSHINO^{1, 2}

¹ 神戸大学自然科学系先端融合研究環・バイオシグナル研究センター, ² 大学院医学研究科質量分析総合センター ¹ *Biosignal Research Center, Organization of Advanced Science and Technology, and* ² *the Integrated Center for Mass Spectrometry, Graduate School of Medicine, Kobe University, Kobe, JAPAN*

(Received January 25, 2008; Accepted January 29, 2008)

【質問】 FAB (fast atom bombardment) 法や MALDI (matrix-assisted laser desorption ionization) 法を使って有機化合物の質量分析をしています。これらのイオン化法では、試料分子は通常プロトンが付加した状態でイオン化されていると理解しています。これまでこのタイプのイオンに対して「プロトン化分子イオン」という用語を使ってきました。しかし、この用語は不適切であるとの指摘を受けました。なぜ不適切なのでしょう。その理由を教えてください。また適切な表現法を教えてください。

【回答】

試料分子にプロトンが一つ付加することによって生成したイオンは、日本語では「プロトン付加分子」もしくは「プロトン化分子」と呼ばれています。英語では「protonated molecule」です。記号は $[M+H]^+$ もしくは MH^+ が用いられています。

確かにこのタイプのイオンは「プロトン化分子イオン」、英語でも「protonated molecular ion」と表現されることがあります。しかしながら、これらの用語を使用することは適切ではありません。

電子が脱離もしくは付加することによって生成した「分子イオン」と呼ばれるイオンがあります。「プロトン化分子イオン」という表現では、この分子イオンがプロトン化された化学種、分子イオンにプロトンが付加した化学種だと誤解されるおそれがあります。

現在は、プロトン付加分子として試料分子をイオン化させる質量分析法が主流となっていますが、歴史的には電子が脱離もしくは付加することによって生成する分子イオンとして試料分子をイオン化させる電子イオン化質量分析の応用が先行していました。この「分子イオン」という用語が先に存在していたため、電子に換わってプロトンが付加することによって生成したイオンが「プロトン化分子イオ

ン」と表現されてしまったのではないかと思います。また「分子イオン」という用語とは関係なく、分子にプロトンが付加することによって生成したイオン、分子がプロトン化されたイオン、という意味で「プロトン化分子イオン」と表現されてしまったとも考えられます。

しかし、現時点で国際純正・応用化学連合 International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) が推奨する用語としては「protonated molecule」が該当する唯一の用語です^{1)~3)}。日本語では「プロトン付加分子」^{4), 5)} もしくは「プロトン化分子」⁷⁾ です。さらに IUPAC の用語集などに記載されている「protonated molecule」の解説文にも「protonated molecular ion」は不適切な用語であり、使用しないよう勧告されています^{1)~3), 7)~9)}。

プロトン付加分子など、分子イオン以外のイオンが生成するイオン化法が開発され利用され始めてから、分子イオンと同じではないが分子がイオンになったもの、分子イオンもどきという意味で「擬分子イオン」、英語では「pseudomolecular ion」、「quasi-molecular ion」という用語がプロトン付加分子を表す際に使われていました。これらの用語も不適切な点が多く、現在 IUPAC、日本質量分析学会などからは使用しないよう勧告されています^{3)~6), 9)}。

「プロトン化分子イオン」や「擬分子イオン」という用語

Correspondence to: Ken-ichi YOSHINO, *Biosignal Research Center, Organization of Advanced Science and Technology, Kobe University, 1-1 Rokkodai-cho, Nada-ku, Kobe 657-8501, JAPAN and the Integrated Center for Mass Spectrometry, Graduate School of Medicine, Kobe University, 7-5-1 Kusunoki-cho, Chuo-ku, Kobe 650-0017, JAPAN*, e-mail: kyoshino@kobe-u.ac.jp
吉野健一, 神戸大学自然科学系先端融合研究環・バイオシグナル研究センター, 〒657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1, 神戸大学大学院医学研究科質量分析総合センター, 〒650-0017 神戸市中央区楠町 7-5-1

がプロトン付加分子に対して用いられてきた一つの理由として、実態がイオンであるにもかかわらず、「プロトン付加分子」という表現では語尾が分子で終わることから、言葉としては電氣的に中性な分子のように感じ違和感を抱かせてしまうことも考えられます。しかし、「プロトン付加分子」は用語全体を考えれば正電荷をもっていることになります。

「分子イオン」だけでは正電荷、負電荷の判断はできませんが、「プロトン化分子イオン」という表現では、正の分子イオンがプロトン化される、すなわち同じ電荷をもった粒子どうしが反応したことを示すことになってしまいます。一方、負の分子イオン（一価）がプロトン化された場合、電氣的には中性になってしまい、「プロトン化分子イオン」という表現では語尾はイオンですが用語全体の意味としてはイオンではありません。

分子がイオンになったからとの単純な感覚でプロトン付加分子に対しても「分子イオン」という用語が使われることもあります、これはさらに初歩的な誤用です¹⁰⁾。

文 献

- 1) "Compendium of Chemical Terminology, IUPAC Recommendations, 2nd Edition," complicated by A. D. McNaught and A. Wilkinson, Blackwell Science (1997); URL: <<http://goldbook.iupac.org>>.
- 2) "Compendium of Analytical Nomenclature: Definitive Rules 1997, 3rd Edition," prepared for publication by J. Inczédy, T. Lengyel, and A. M. Ure, Blackwell Science (1998); URL: <http://www.iupac.org/publications/analytical_compendium>.
- 3) K. K. Murray, R. K. Boyd, M. N. Eberlin, G. J. Langley, L. Li, and Y. Naito, "Standard Definitions of Terms Relating to Mass Spectrometry (IUPAC Recommendations 2006)," Draft, 31 Aug 2006; URL: <http://www.iupac.org/reports/provisional/abstract06/murray_prs.pdf>.
- 4) 吉野健一, *J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.*, **54**, 255 (2006).
- 5) J. H. Gross, "マスマススペクトロメトリー," 日本質量分析学会出版委員会: 平岡賢三, 中村健道, 内藤康秀, 佐藤浩昭・訳, シュプリンガー・ジャパン, 東京 (2007), p. 136.
- 6) "マスマススペクトロメトリー関係用語集 (第2版, 第3刷)," 奥野和彦, 高山光男, 中田尚男, 平岡賢三・編, 日本質量分析学会, 東京 (2005).
- 7) 吉野健一, *J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.*, **54**, 119 (2006).
- 8) P. Price, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2**, 336 (1991).
- 9) O. D. Sparkman, "Mass Spectrometry Desk Reference, 2nd Edition," Global View Publishing, Pittsburgh (2006), p. 53.
- 10) 吉野健一, *J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.*, **54**, 57 (2006).