特集：イオン化

巻頭言：
「イオン化」特集号に寄せて

Preface: Issuing “Ionization Mechanisms”

京都大学大学院工学研究科附属量子理工学教育研究センター

松尾二郎

Jiro MATSUO

質量分析法とイオン化はお互いに密接に関連し発展してきた。特に本特集号でも扱っている MALDI や ESI に代表される「ソフトイオン化法」の発明により、質量分析法の応用分野は飛躍的に拡大してきた。その一つの MALDI が田中耕一氏の発明によるということは、わが国の質量分析学会にとって誇るべき成果であり、本誌でも MALDI に関する特集がこれまでに組まれてきた。一方、応用分野の拡大に伴い質量分析装置や分析手法のブラックボックス化も進行しており、エンドユーザーは装置を使っているのか装置に使われているのかわからないような状況も散見される。

また、DART, DESI の開発以降、その簡便さも相まって大気圧イオン化法の開発が活発化し、まさに百花繚乱のごとく提案され、さまざまな名前が付けられている。しかし、イオン化という視点からもう一度整理すると似通ったものも多い。気相以外の状態にある分子をイオン化・質量分析するためには、気化・脱離といった新たな現象が関与するため、イオン化、気化、脱離という本来異なる現象が混同されているケースも見受けられる。一方、気化・脱離とイオン化が同時に起こる（起こす？）手法も多く、このこともイオン化メカニズムを複雑にしている理由の一つである。本特集では、MALDI や ESI に加え、化学イオン化法や FAB などの衝突脱離・イオン法と、異なるイオン化手法を取り上げており、多様性に富んだイオン化機構の一端に触れていただければと期待している。これまでさまざまな角度から研究されている MALDI や ESI のイオン化のメカニズムですら、いまだに多くの謎を残しており今後の研究が待たれる。

一方、日常の測定で条件の最適化として行われている調整などを、イオン化のメカニズムという視点からもう一度見つめ直すことも、とても有意義である。最適化問題の多くはローカルミニマムが存在するため、原理原則に基づいた最適化を行うことが肝要である。多くの物理・化学現象が複雑に絡み合っているイオン化において、メカニズムを考慮することで単なる条件出しから、本来あるべきイオン化条件の探査へとつながる。さらに、分析対象にどのイオン化法が最も適しているのかは多くのユーザーを悩ませる課題であり、その際大きな助けとなるのがイオン化メカニズムの理解である。本特集号は質量分析の発展に精力的に取り組んでいる気鋭の方々に執筆いただいております。本号がイオン化に興味を持ってもらう契機となればと願っている。応用分野の拡大とともに、質量分析法には高感度化や迅速化などさらなる発展が期待され求められている。革新的な性能向上のためには、今一度の基本原則に立ち戻った研究が肝要であり、それがブレークスルーを生み出す源泉となる。複雑なイオン化を調べることは容易ではないが、大きな飛躍を目指して挑戦と創造を実現してほしい。