

IUPAC 委託プロジェクトによる 質量分析の標準用語の改訂



内藤 康秀

はじめに

質量分析は、学術研究や産業の多種多様な分野における基盤技術であるが、近年の質量分析技術の進歩は目覚しく、応用範囲も急速に拡大している。それに伴い、使用する用語の不統一や定義上の混乱が発生し、質量分析に関する正しいコミュニケーションが阻害されつつある。質量分析用語を標準化する必要性は、これまでにないほど高い状況にあるといえる。各国の質量分析学会は標準化した用語体系を整備し¹⁾²⁾、質量分析関係のジャーナルなどでは用語の使用に関して独自に規定を設けているが、その内容は国際純正・応用化学連合 (International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC) が不定期に行う勧告にほぼ準拠している³⁾。IUPAC は質量分析用語の標準定義について勧告を行う唯一の国際的機関である。質量分析用語についての IUPAC 勧告が最後に行われた 1991 年以降、質量分析は主としてバイオ応用分野で著しい発展を遂げ、技法等に関して多くの新しい概念・用語が生み出された。急増した新しい質量分析用語の収録と、質量分析計の性能向上などのため従来の概念が当てはまらなくなりつつある用語の再定義を目指して、IUPAC 勧告の大規模な改訂作業が IUPAC の委託事業として進められている⁴⁾。

IUPAC とは

IUPAC は化学分野の国際学術機関で、加盟国・準加盟国をあわせて 68 か国が加入している (2005 年時点)。各国の代表や関連分野ごとの専門家からなる常設の委員会、およびプロジェクトを委託された非常設の作業部会で構成される。その主な活動は、標準原子量の制定、元素名や化合物名の決定、化学に関する啓蒙活動^{けいもう}などであるが、化学用語の標準化も重要なプロジェクトとして取
IUPAC-Commissioned Project for Standard Definitions of Terms Relating to Mass Spectrometry.

り組まれている。

用語標準化のプロジェクトは、関連する分野を担当する部門 (division) の委託により非常設の作業部会において進められ、その答申に基づいて各分野についての標準用語の IUPAC 勧告が出される。これまでに出了された勧告は部門ごとに編纂され、IUPAC の公式出版物である用語大要集 (IUPAC Nomenclature Books, 全 7 巻) にまとめられている。例えば、質量分析用語についての前回の勧告は、分析化学分野についてまとめた分析用語大要 Compendium of Analytical Nomenclature (カバーの色から IUPAC Orange Book と呼ばれる) の第 12 章を構成している。Compendium of Analytical Nomenclature はオンライン版 (PDF 形式) でも閲覧できる⁵⁾。

質量分析用語プロジェクトの現状と収録予定用語

質量分析用語についての新しい勧告は、IUPAC のオフィシャルジャーナル *Pure and Applied Chemistry* 誌の掲載記事として公表される。その原稿は作業部会によって約 3 年かけて準備され、投稿された原稿は世界各国の約 30 名の査読員によって審査される。2006 年 12 月現在では、査読意見に基づく改訂稿の準備が行われている段階である。

IUPAC 勧告に収録が予定されている用語 (見出し語) は、2006 年 12 月の時点で 289 語である。新規追加予定の語を抜粋してアルファベット順に示す。

accurate mass
a-ion
analog ion
array detector
atmospheric pressure chemical ionization
atmospheric pressure matrix-assisted laser desorption/ionization
atmospheric pressure photoionization
autodetachment
average mass
b-ion
blackbody infrared radiative dissociation
cationized molecule
centroid acquisition
charge remote fragmentation
c-ion
classical ion
collision gas
consecutive reaction monitoring
constant neutral loss spectrum
constant neutral mass gain spectrum
conversion dynode
curved field reflectron
Daly detector
delayed extraction

diagnostic ion
desorption electrospray ionization
direct insertion probe
direct liquid introduction
electron capture dissociation
electrospray ionization
exact mass
extracted ion chromatogram
focal plane detector
forward library search
glow discharge ionization
high-energy collision-induced dissociation
high-field asymmetric waveform ion mobility spectrometry
hydrogen/deuterium exchange
imaging mass spectrometry
inductively coupled plasma
infrared multiphoton dissociation
in-source collision-induced dissociation
ion desolvation
ion gate
ion/ion reaction
isotope ratio mass spectrometry
isotopologue ions
isotopomeric ions
laser desorption
linear ion trap
liquid secondary ionization
low-energy collision-induced dissociation
mass calibration
mass defect
mass selective axial ejection
mass spectral library
Mathieu stability diagram
matrix-assisted laser desorption/ionization
membrane inlet
microchannel plate
MSⁿ
multiple-stage mass spectrometry
m/z
nanoelectrospray
neutralization reionization mass spectrometry
neutral loss
nitrogen rule
nominal mass
non-classical ion
Nth generation product ion
Nth generation product ion spectrum
odd-electron rule
onium ion
orbitrap
orthogonal extraction

Paul ion trap
photodissociation
pneumatically-assisted electrospray ionization
post-acceleration detector
post-source decay
precursor ion spectrum
product ion spectrum
progeny fragment ions
pyrolysis mass spectrometry
reference ion
reflectron
resonance-enhanced multiphoton ionization
resonance ion ejection
reverse library search
selected ion flow tube
selected reaction monitoring
space charge effect
stored waveform inverse Fourier transform
surface-induced dissociation
surface-induced reaction
sustained off-resonance irradiation
tandem mass spectrometry in time
tandem mass spectrometry in space
time lag focusing
triple quadrupole mass spectrometer
x-ion
y-ion
z-ion

おわりに

上記に掲げた用語は変更・削除される可能性も残っているため、現時点で公式に推奨するものではない。まもなく公表される IUPAC 勧告に注意されることを願う。

なお、ここに引用した文献 4) と 5) の URL については 2007 年 4 月 23 日に最終確認している。

文 献

- 1) 奥野和彦, 高山光男, 中田尚男, 平岡賢三: “マスマススペクトロメトリー関係用語集”, 日本質量分析学会編, (2005), (国際文献印刷社).
- 2) P. Price: *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2**, 336 (1991).
- 3) J. F. J. Todd: *Pure & Appl. Chem.*, **63**, 1541 (1991).
- 4) <http://www.iupac.org/projects/2003/2003-056-2-500.html>
- 5) http://www.iupac.org/publications/analytical_compendium/



内藤康秀 (Yasuhide Naito)
光産業創成大学院大学 (〒431-1202 静岡県浜松市西区呉松町 1955-1)。電気通信大学大学院修士課程修了。博士 (工学)。
《現在の研究テーマ》超高分解能・高速イメージング質量分析計 (質量顕微鏡) の開発。