
まえがき

質量分析は、馴染みの薄い人たちには、分子量をはかれるだけの怪しげでややこしい方法と思われている節がある。質量分析について「怪奇と幻想の物語」のごとく語られるのを聞いた学生たちが、実際に質量分析と関わる前に先入観を植え付けられてしまうこともある。「悪い噂」の源をたどれば、学生時代に巨大な質量分析装置を相手に四苦八苦してようやく得た1枚のマスペクトルに歓喜した記憶だけが残っている、かつてのユーザーにいきつくかもしれない。もちろん、現代の質量分析は、生みの親である J.J. Thomson の時代から 100 年余りを経て大きく様変わりしている。学ぶべきことは山ほどあるが、それらはきちっと体系付けて整理されている。その背景には、質量分析を物理学の世界から化学のための新しい分析技術として生み、育ててきた先達の不断の努力があることはいままでもない。

本書が生まれるまでの経緯

1980 年代の終わり頃、著者はダルムシュタット工科大学の J.J. Veith 質量分析研究室に初めて足を踏み入れた。化学実験室特有の異臭がない、明るく清潔な室内に並ぶたくさんのステンレス製のフランジや電子機器のキャビネットに興味をそそられ見て歩くうち、私はどうやら CMSD (chronic mass spectrometry disease: 慢性質量分析中毒症) に感染してしまったらしい。Veith 研で過ごしたその後何年かの間に、しだいに質量分析学者へと変身していった私は、当時すでに入手困難であった “Fundamental Aspects of Organic Mass Spectrometry” や “Metastable Ions” などといった教科書から多くを学んだ。1994 年、イミニウムイオンの気相単分子分解反応に関する研究で学位論文を完成した後、現在の仕事に就いた。以後、ハイデルベルク大学化学研究所の質量分析施設長としてはたらくかたわら、入門コースや質量分析セミナーによる教育に携わっている。

質量分析に関してどんな本で勉強したらよいかと学生たちに訊ねられた際、個々のトピックスに関して優れた本はたくさんあるものの、私の個人的見解として質量分析全体を学ぶのに適した教科書はないように思われた。結果として、2年にわたる執筆活動が始まることになった。

第 3 版の構成

本書は 2004 年の初版から版を重ね 3 版となった。改版の機会に新しい事項を盛り込みつつ改良をはかっていくことは著者の私に課せられた責務である。初版から 2 版にいたる際に 3 つの章を新たに加え、取り扱う範囲や全体的な構成をかなり改めた。3 版の章立ては 2 版とほとんど同じであるが、発展し続ける質量分析分野の新たな展開を的確に取り入れるため、多くの新しい節を書き加えた。2 版の内容を改めて吟味し、何百の加筆、訂正、変更などを行った。初版からは無論のこと、2 版の 15 章すべてを吟味し、手を加えた。

新たな内容

初版では**タンデム質量分析**に関する基礎的事項は2章の中で簡単に述べたが、2版ではこれを独立の章として大幅に拡充し、CID、ECD、ETD、IRMPDなどの解離法や実際の装置と測定モードとを関連付けながら詳述した。3版ではさらに巨大分子のSIDによる解離や多彩な測定モードを実現するハイブリッド装置など、新たな内容が加わっている。同じく2版から単独の章として登場したDARTとDESIを中心とするアンビエント質量分析に、3版では新たにREIMSが加わり、**アンビエント脱離イオン化**と関連手法に関する章として拡充した。本書はおもに有機物質を対象とした質量分析について扱っているが、2版からは**無機質量分析**についても1つの章で概説している。化学形態分析（スペシエーション分析）やメタロミクス、組織の元素イメージングなど、従来からの微量元素分析と環境科学、医学生物学などへの質量分析応用のギャップを埋める話題についても引き続き取り上げる。有機物質対象の質量分析からさらに踏み出していこうとする際の参考にもなるだろう。

初版から標題を受け継ぐ各章の中でも、随所で注目に値するさまざまな新手法や装置が登場し、急速に普及しつつある。**装置論**は2版、3版と順次大幅に拡充されている。2版ではオービトラップが新たに加わるとともに、TOF/TOF、リニアイオントラップ、FT-ICRについても大幅に拡充した。3版ではさらに多重周回型や多重反射型のTOF、動的整合ICRセルなどが加わった。日進月歩のハイブリッド装置やイオン移動度についても、2版に引き続きさらに充実させた。高分解能精密質量測定が可能な市販装置のさらなる普及とニーズの拡大を受け、**同位体組成**と**精密質量**の章を2版に続き3版でも拡充した。上述のアンビエント脱離イオン化に加え、3版でもほかの5つの章で引き続き主要なソフトイオン化（CI、APCI、APPI、FAB、LSIMS、FI、FD、LIFDI、ESI、LDI、MALDI）について扱っている。MALDIやESIの生体高分子への応用についてもより詳しく取り上げた。ハイフネーテッド技術の章では、定量分析に加え、クロマトグラフィー技術（GC、LC）についての記述を拡充した。GC-MSやLC-MSに加え2版で登場したイオン移動度分析とMSの結合（IMS-MS）についても新たな内容を加えた。

過去10年ほどの間にわれわれが文献にアクセスする方法は大きく様変わりした。初版の執筆にとりかかった2001年当時は、参考文献蒐集のため近隣の研究施設などの図書室に足しげく通ったものであるが、今日ではほとんどの雑誌の電子版により入手可能になっている。読者の便宜をはかるため、引用文献リストにはデジタルオブジェクト識別子（DOI）を付した。

質量分析は分析科学の一分野であるが、幅広い学問分野に基礎をおくさまざまな原理にもとづく多様な方法、進歩し続ける装置や応用分野を含む、学際的かつ複雑な学問分野でもある。構成や説明の仕方に意を注ぎ、少しでも理解しやすく、学びやすくなるよう工夫した。約1000ページもある教科書は取りつき難いと感じるかもしれないが、まずは気軽にいちばん興味をもった箇所から読んでいただいいてよい。随所でデータ解析や測定法の選択などの実践的内容が背景となる基礎や理論とつながっていることがわかれば、より深く興味をもっていただけるだろう。より学習しやすくするため、3版では具体的に以下のような改訂を行った。

- ・文章表現を工夫し、簡潔さを保ちつつ「いかに」だけでなく「なぜそうするのか」を説明することに力を入れた。
- ・図版を初版の倍近くまで増やし、一部をカラー化した。写真や図式を増やしたことで、実際の装置や測定手順などの理解につながる重要情報が得やすくなっている。

- ・要所においてフローチャートを導入し、実験や操作手順、スペクトル解釈や装置や方法の選択に際する考え方などを示した。
- ・箇条書きを随所に用い、1つの方法などに関するさまざまな特徴、問題点、前提、性質などをわかりやすく示した。
- ・個々の方法や応用の実例を増やし、実際的な指針を示す「ハウツー」形式の記載も一部で採用した。
- ・実例や注意点などのコラムの主題が一目で把握できるよう、簡潔な見出しを付けた。
- ・わかりやすさ向上のため、2版から各章冒頭に「学習の目的」を掲げているが、3版ではさらに各章末に、方法や概念などの基本、性能と制限事項、主たる応用、質量分析全般における位置付けなど、項目に分けた概要を示した。装置論（4章）ではさまざまな分析部の概要を掲載した。
- ・本書のウェブサイト www.ms-textbook.com を更新し、新しい練習問題と追加資料を掲載した。

謝 辞

まず、本書旧版の読者すべてに、厚くお礼申し上げたい。読者の質量分析への興味と本書を通じてさらに学びたい、という意欲がなかったら、本書が世に出ることはなかっただろう。世界中で、質量分析の教育に際し、本書を教材にしたり本書を参考書に推薦して下さった指導者の方々にも心より感謝する。

教科書の執筆は、バランスよく多くの人々の学識と知見、発明発見などを収録し、整理することにはほかならない。本書の内容は、それぞれの分野で質量分析に貢献した何百人もの研究者の叡智と真摯かつ献身的な努力の結果にもとづく。

執筆の過程で多くの方々親切に助けられた。初版日本語版の訳者、佐藤浩昭、内藤康秀、中村健道、平岡賢三の各氏の詳細にまでいたる知識と注意深さに感謝している。貴重かつ歓迎すべきコメントは世界各国の読者、書評者、質量分析の同僚からも頂戴し、それらにもとづき改良できた。

2版の内容は、何名もの高名で有能な質量分析研究者に、それぞれの専門分野に応じて精査いただいた。特に、以下の方々に厚く御礼申し上げる。Jürgen Grotemeyer, Universität Kiel (2章, イオン化とイオンの解離をつかさどる原理), Alexander Makarov, Thermo Fisher Scientific, Bremen (4章, 装置論), Christoph A. Schalley, Freie Universität Berlin (9章, タンデム質量分析), Belá Paizs, German Cancer Research Center, Heidelberg (11章, マトリックス支援レーザー脱離イオン化), Zoltán Takáts, Universität Gießen (13章, アンビエント質量分析), Detlef Günther, ETH Zürich (15章, 無機質量分析)。

初版各章を査読くださった以下の方々に感謝する。P. Enders, Springer-Verlag, Heidelberg (序論), J. Grotemeyer, University of Kiel (気相イオンの化学), S. Giesa, Bayer Industry Services, Leverkusen (同位体), J. Franzen, Bruker Daltonik, Bremen (装置論), J. O. Metzger, University of Oldenburg (電子イオン化, 有機イオンのフラグメンテーションとEIマスペクトルの解釈), J. R. Wesener, Bayer Industry Services, Leverkusen (化学イオン化), J. J. Veith, Technical University of Darmstadt (電界イオン化と電界脱離), R. M. Caprioli, Vanderbilt University, Nashville (高速原子衝撃), M. Karas, University of Frankfurt (マトリックス支援レーザー脱離イオン化), M. Wilm, European Molecular Biology Laboratory, Heidelberg (エレクトロスプレーイオン化), M. W. Linscheid, Humboldt University, Berlin (ハイフネーテッド技術)。

多くの質量分析装置や関連技術装置の会社から、図版や写真を提供いただいた。また、Heidelberg 大学ほかの多くの研究者から実験例の紹介をお許しいただいた。いくつもの出版社から、図版の使用を許可いただいた。National Institute of Standards and Technology (S. Stein, G. Mallard, J. Sauerwein) から、NIST/EPA/NIH Mass Spectral Library 収載の多数の電子イオン化マススペクトルの提供を受けた。厚く御礼申し上げる。

本学 OCI の前所長 Oliver Trapp, 前化学・地球科学部長 Heinfried Schöler の両氏には、本務と並行して 3 版を執筆することをお許しいただいた。深謝する。当質量分析施設の日常業務を遅滞なく進めてくれたスタッフ Doris Lang, Iris Mitsch, Norbert Nieth に御礼申し上げます。今回も、Theodor C. H. Cole に丁寧な英文校閲をしていただいた。最後に、執筆のために帰宅が遅くなったり土曜に不在がちとなった私を許してくれた家族に感謝する。

それでは皆さん、質量分析の世界について学ぶ楽しく有意義な時間を過ごしましょう！

Jürgen H. Gross

Institute of Organic Chemistry (OCI)
Heidelberg University
Im Neuenheimer Feld 270
69120 Heidelberg, Germany
e-mail: author@ms-textbook.com

訳者まえがき

本書は、J. H. Gross 著 “Mass Spectrometry — A Textbook, 3rd ed.” (Springer, 2017) の日本語版である。日本質量分析学会出版委員会では 2005～2007 年にかけて、世界的にも定評の高かった本書初版の日本語訳を行った。それ以後、「質量分析に関して学ぶのに何かよい教科書はありませんか」と問われた際、返答に窮することなく、質量分析全体をしっかりと体系的に学べる教科書として本書を推薦できるようになった。推薦できる教科書が見当たらなければ自分で書く、ということを決意し、たいへん優れた 1 冊の教科書にまとめ上げた著者の尽力と力量に改めて大きな敬意を表したい。再び本書の日本語訳に携わることができた幸運に感謝するとともに、本書が多少なりとも日本の質量分析ユーザーや関係者のお役に立てることを願うものである。英語版は 2011 年に 2 版が刊行されたが、2012 年にシュプリンガー・ジャパン（株）が和書から撤退したことなどもあり、2 版の翻訳は棚上げとなっていた。幸い日本語版は丸善出版（株）に引き継がれ、今般、同社より 3 版の日本語訳を刊行できる運びとなった。改訂新版刊行まで約 12 年を経ってしまったが、結果的には「満を持した」形となり、初版から大きく更新された 2 版の内容に加え、以後に登場した質量分析分野の新しい大きなうねりなどもしっかり取り込まれた形で読者にお届けできることになった。

本書で取り扱われている内容は広範かつ詳細ではあるが、正確さを保ちつつ自学用の教科書としても理解しやすくなるよう工夫が施されている。実用的な観点を含んだ応用事例もふんだんに紹介されているだけでなく、背景原理や基礎的事項との関連が詳細に解説されている。実用書的にも利用可能なだけでなく、単なるハウツー本とは異なり真の応用力を身に付けていく手助けにもなるだろう。分野横断的な質量分析のさまざまな側面に関する解説にはよく選ばれた引用文献が付されており、さまざまな分野で質量分析の実務や研究に携わっておられる方々にも座右の参考書として、あるいは便覧的に活用していただけるだろう。

生命科学分野における質量分析応用のパイオニアの 1 人である Peter Roepstorff (Univ. Southern Denmark) は原著 2 版に寄せた序文の中で次のように述べている。

“It is my wish that the new generation of mass spectrometry users will spend time to understand their instruments and the requirements for optimal preparation of the samples and it is my hope that this book will be read by many of them so that they can use their techniques to the best of the equipment's potential.”

ブラックボックス化が進む近年の装置を使う多くのユーザーの方々には、背景原理や基礎的事項から説き起こした本書を通読するの必要性を感じにくいかもしれないが、まずは気軽に必要とする事項、興味のある箇所から読んでみていただきたい。少しずつ掘り下げ、背景や関連事項を理解していく中で、質量分析のさまざまな側面を踏まえた新たな興味やアイデアが生まれてくるであろう。本書を通読されたユーザーは、装置や技術の潜在能力を余すところなく理解し、活用、駆使するスーパーユーザーへ変身するであろう。

翻訳に際しては、著者の意図を尊重し簡単でわかりやすい表現を心がけつつ、原著で説明不十分なところは必要に応じて補足したり「訳者注」を付した。広範な内容を単著でまとめ上げた著者の正確性は称賛に値する

が、無論、原著にも誤りが皆無というわけではなかった。邦訳に際し見出された誤りは必要に応じ著者の確認もとりつつ日本語版において修正したが、その旨を当該箇所ではいちいち言及はしていない。訳文の内容については訳者相互で読み合わせを行い最善を尽くしたが、見落としや思わぬ間違いもあるだろう。読者諸兄弟のご叱責を賜りたい。

訳に関してはもとより訳者が各個人として全責任を負うべきものであるが、藤原亮正（大阪府立大学）、吉野健一（神戸大学）、佐藤貴也（日本電子（株））、窪田雅之（日本ウォーターズ（株））、高田祐輔（北海道大学）、藤巻奨（日本電子（株））、松尾二郎（京都大学）、大谷肇（名古屋工業大学）、北川慎也（名古屋工業大学）、関本奏子（横浜市立大学）、松崎浩之（東京大学）の各氏には、各章原稿に注意深いお目通しを頂き、多くの貴重なコメントを頂戴した。初版の際に同じくお世話になった大谷肇、高橋豊（日本電子（株））、中田尚男（愛知教育大学名誉教授）、橋本豊（横浜市立大学）、藤巻奨、益田勝吉（サントリー生有研）、山岡寛史（大阪府立大学）、渡部賢二（北海道大学）の各氏（所属は当時）とともに、ここに厚く御礼申し上げます。最後に、刊行にこぎつけるまで気長におつきあいくださりいろいろと尽力いただきました丸善出版（株）編集部の皆様に深謝いたします。

読者の皆様からの訳や内容に対するコメントなどを今後の参考とさせていただきたく、以下宛に忌憚なきご意見をお寄せいただければ幸いです。

コメント等送付先（訳者）：gross-textbook2020@mssj.jp

中村健道（訳者代表、日本質量分析学会出版委員会）

各章担当訳者（日本質量分析学会出版委員）一覧

平岡賢三（山梨大学）	1章, 7章, 12章
中村健道（理化学研究所）	2章, 3章, 5章, 6章, 9章, 10章, 13章
内藤康秀（光産業創成大学院大学）	4章, 8章, 15章, 付録
佐藤浩昭（産業技術総合研究所）	11章, 14章