

意外に知らない分子量と質量の単位の違い

吉野 健一

生物学の研究を進めるためにさまざまな実験が行われる。得られた実験結果は、視覚的な画像データとして表示されることもあるが、数量的に表されることも多い。実験結果を数量として表示する際に「単位」が用いられる。しかし、普段何気なく使っている単位のことを深く考え、議論する機会は少ない。そのためか、バイオ系の論文には誤った単位表記がなされた図表や記述を見かけることがある。科学では実験結果の数量を正確に伝えることが求められている。そのためには、使用する単位を正しく理解する必要がある。本稿では、バイオ系の論文で頻用される単位の中で、誤解の多い分子量と質量の単位について解説する。

分子量には単位は不要

ドデシル硫酸ナトリウム—ポリアクリルアミドゲル電気泳動 (SDS-PAGE) は、タンパク質を扱う研究には

不可欠な実験手法である。試料タンパク質の分子量を概算するために、分子量マーカーが試料タンパク質と同時に泳動される。実験結果である泳動像が論文や学会発表で表示される場合、試料タンパク質やマーカーの分子量の数値が表記される。その際「分子量 66 kDa」のように分子量の単位として“kDa”が用いられることが多い (図1 レーン1)。特にバイオ系の文献でこのような単位表記が見られるが、科学的には誤った表記法である。分子量は単位のない無次元量として定義されている数量なので、単位をつける必要はない。試薬瓶のラベルの分子量表示に単位はつけられていないはずである。分子量の概念は高校課程の化学で履修するが、分子量に単位がつけられている教科書はない。大学入試の問題文に「分子量 66 kDa」と書かれた場合、出題後問題になるのではないだろうか。

分子量は、分子を構成する各原子の原子量と原子数の

不適切な電気泳動像縦軸ラベル表記法

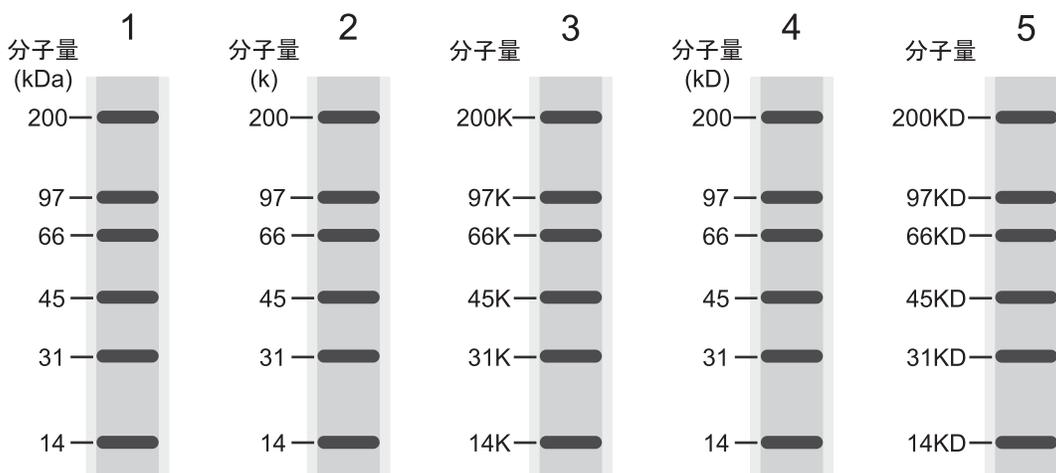


図1. 電気泳動像を表示する際の不適切な縦軸ラベル表記法。レーン1, 4, 5にはキロダルトンの単位がつけられているが、相対値である分子量に単位をつける必要はない。

レーン2, 3では、キロが単位のように表記されているが、SI接頭語であるキロの記号を単位記号のように単独で用いることはできないので、これらの表記法も不適切。縦軸を分子量として表示するのであれば図3レーン1のようにすべての桁の数字を表記するか、図3レーン3, 4の表記法が望ましい。

レーン4, 5のような表記法をしばしば見かける。しかし、ダルトンの単位記号は“Da”と定められているので、D一文字をダルトンの単位記号として使用することはできない。そもそも縦軸を分子量として表示するのであれば、質量の単位であるキロダルトンは不要。

$$\begin{aligned}
 \boxed{\text{炭素の原子量}} &= \frac{{}^{12}\text{Cの質量} \times {}^{12}\text{Cの存在度} + {}^{13}\text{Cの質量} \times {}^{13}\text{Cの存在度}}{{}^{12}\text{Cの質量} \div 12} \\
 &= \frac{12 \text{ Da} \times 0.99 + 13.00 \text{ Da} \times 0.01}{12 \text{ Da} \div 12} \\
 &= \frac{11.88 \text{ Da} + 0.13 \text{ Da}}{1 \text{ Da}} \\
 &= 12.01
 \end{aligned}$$

分母にも分子にもDaの単位がある。約分するとDaの単位はなくなる。原子量は無次元量。

図2. 炭素の原子量の計算式

積の総和として計算される数量である。分子量の基になる原子量は、ある元素について、同位体存在度を重率として掛けた原子質量加重平均値の、 ${}^{12}\text{C}$ 原子1個の質量の12分の1量（統一原子質量単位量）に対する比（相対値）として定義されている（図2）。たとえば、炭素の原子量は12.01である¹⁾。地球上の炭素原子は、 ${}^{12}\text{C}$ と中性子が一つ多い ${}^{13}\text{C}$ が約99：1の割合で存在しており²⁾、そのために原子量の基準元素である炭素の原子量も12ちょうどにはならない（図2）。炭素には放射性同位元素である ${}^{14}\text{C}$ の存在が知られているが、その存在度はきわめて小さい（ 1.2×10^{-4} ppm）ので計算上無視できる。原子量は、質量に対する質量の比である。質量の単位をもった数量を質量の単位をもった数量で割り算するので質量の単位（次元）がなくなる（図2）。質量の比という点では比重と同じである。比重には単位をつけない。比重を問う試験問題に“kg”の単位をつけて解答した場合、間違いなく減点される。相対値である原子量に基づく分子量も相対値である。相対値なので単位を表記する必要はない。分子量という用語から相対値であることを読み取ることはできないかもしれないが、分子量の別名は相対分子質量（relative molecular mass）である³⁾。

数値に単位をつけないと、科学的な数量として物足りない感じを受けるかもしれない。しかし、科学で扱う数量の中には、単位表記が必要ない相対値として定義された数量は数多く存在している。前述の「比重」に加え、飛行機の速度などに用いられる「マッハ（mach）」にも単位をつける必要はない。マッハは音速との相対値で、たとえば最新型のボーイング787型機の巡航速度は「マッハ0.85」と表記されている。「マッハ」は速度の単位ではなく、質量や時間と同じように物理量の名称で

ある。マッハと同じ相対値である分子量も「分子量66 kDa」ではなく、「分子量66,000」が正しい表し方である（図3レーン1）。

電気泳動から求められる数値に“kDa”の単位をつけるのであれば、「分子量」ではなく「質量」の値として表記すれば問題ない（図3レーン2）。無次元量の分子量に単位をつけて表記することが誤りであり、電気泳動で得られた結果（数量）から質量を概算し、単位“kDa”をつけて表記することは誤りではない。表1に“kDa”を単位として用いることが不適切な表記例と適切な表記例を示した。“kDa”は質量の単位であること、そして分子量は質量に由来しているが相対値として定義されているので単位表記の必要がないこと、の2点がポイント

表1. “kDa”を単位として用いることが不適切な表記例と適切な表記例。MWはmolecular weight（分子量）の略語。相対分子質量や M_r は分子量と同義。分子量同様、単位表記は必要ない。イタリック体の記号*m*は質量を表す。

×	分子量 (kDa)
×	MW (kDa)
×	Molecular Weight (kDa)
×	相対分子質量 (kDa)
×	Relative Molecular Mass (kDa)
×	M_r (kDa)
○	質量 (kDa)
◎	質量/kDa
◎	Mass/kDa
◎	Molecular Mass/kDa
◎	<i>m</i> /kDa

望ましい電気泳動像縦軸ラベル表記法

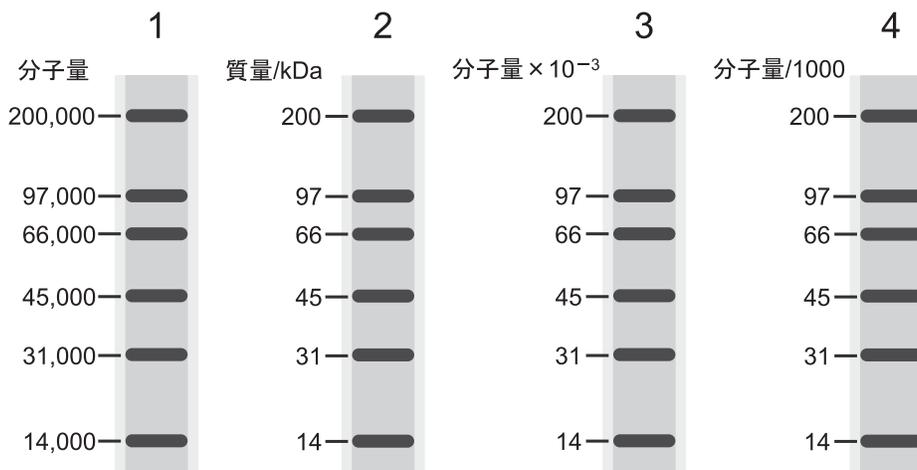


図3. 電気泳動像を表示する際の望ましい縦軸ラベル表記法. 縦軸の数値を分子量として表示する場合, 単位は必要ない(レーン1). “kDa”は質量の単位なので質量の数値として表示する場合は“kDa”をつけても問題ない(レーン2). 物理量 Q は数値 n と単位 U の積である($Q=nU$). たとえば, グラフの縦軸に物理量 Q をプロットする場合, 縦軸には数値のみが表示される. $n=Q/U$ から, n は数量 Q を単位 U で除算した商である. それゆえグラフの数値 n を表すタイトル名(ラベル表記)は, 「物理量名(単位)」の表記法よりも, レーン2のように Q/U の形を用いる「物理量名/単位」の表記法が望ましい. さまざまな点を考慮すれば, 電気泳動像の表示法としては, 本図の中でもレーン2の表記法がもっとも望ましい.

電気泳動図の縦軸を分子量として表示する場合, 有効数字の観点から, レーン1の表記法よりもレーン3, 4の表記法が望ましい. 分子量1000を単位量と考える. ただし接頭語キロの記号を単独で使用することはできないので「分子量/k」や「分子量/K」の表記は不適切となる.

である. 「質量」の二文字が入っていても「相対分子質量 (relative molecular mass)」は分子量と同義語なので, 「相対分子質量」の数値に単位をつけて表記することは適切ではない. “ M_r ”は相対分子質量を表す記号である. 記号“ M_r ”を用いた場合も意味は同じなので単位表記は必要ない.

バイオ系では「質量 (kDa)」のように括弧の中に単位が表記されることが多いが, 「質量/kDa」のように物理量の名称や記号に続けてスラッシュを書き, そのあとに続けて単位を表記する方法が望ましい(図3レーン2, 表1).

分子量の数値に“kDa”の単位をつける誤表記は, バイオ系の多くの論文にみられ, 市販の分子量マーカーのカatalogや説明書などにも頻出している. この誤表記があるからといって, 実験結果そのものが間違っているわけではない. しかしながら, 科学の専門家が, 高校課程の化学で履修する単位表記を誤る状態であり, 正しく表記することに超したことはない. 実験結果そのものが間違っていないという点では, スペルミスと同じかもしれないが, 論文原稿のスペルミスに気づいて修正しない科学者はいないのではないだろうか.

「キロ」を単独で用いることは不可

5桁や6桁の数字を表記するスペースを惜しんでのことだと思われるが, 1000倍を意味するキロが, 単位のごとく, (k) や (K) と表記されたり(図1レーン2), 66,000が66 kや66 Kと表記されたりする(図1レーン3). 分子量を無次元量として表記している点では誤解はないが, 国際単位系 (SI)^{4,5)}のルールに照らし合わせた場合, 問題が残っている. k (キロ) などのSI接頭語は, あくまでも接頭語. 文字通りm (メートル) やg (グラム) のような単位記号の前(頭)につけて使用することだけが許されており, SI接頭語の記号を単独で用いることはできないと定められている. 1000分の1を意味するSI接頭語ミリと長さのSI基本単位メートルは同じ立体の小文字のmを用いるが, ミリ単独での使用が認められた場合, メートルとの区別が不可能となる. 日常会話では「2キロ太った」や「5ミリ長い」など接頭語単独の単位のない表現が許されるかもしれないが, 数量を正確に伝える必要がある科学的な情報伝達を日常会話と同じレベルに置くことはできない.

大文字で定義された単位記号や接頭語記号を, 小文字を用いて表記することや, 小文字で定義された記号を,

大文字を用いて表記することは禁じられている。たとえば、SI接頭語m（ミリ）を大文字のMで表記した場合、混乱を招くことは容易に想像できる。大文字のMは100万倍を意味するメガの記号であり、ミリの 10^9 倍である。

大文字のKを記号として用いるSI接頭語は存在しない。しかし、大文字のKはSI基本単位である熱力学温度（絶対温度）ケルビンを表す記号として定められている。したがって1000倍という意味で大文字のKを使い、66,000を66 Kと表記した場合、国際単位系（SI）のルールに従えば、66ケルビンの熱力学温度を表していることになる。電気泳動は、タンパク質分子の熱力学温度を計測する方法ではないので、大きな混乱はないと思われるが、国際単位系（SI）のルールを逸脱した表記法となってしまう。キロは必ず小文字のkを使うことが望ましい。いずれにせよ、前述のとおりSI接頭語単独で用いることは禁じられているので、66 kという表記も好ましくない。

桁数の多い数字の表記を避けたいのであれば、ラベルに「分子量 $\times 10^{-3}$ 」または「分子量/1000」と表示すればよい（図3レーン3, 4）。このラベル表示があれば66,000を66と、200,000を200と表記できる。電気泳動法から求められる分子量（質量）の正確さは質量分析法とは比較にならないくらい低いので、有効数字の観点からも5桁、6桁の数字を並べることは適当ではない。

分子量に関するもう一つの誤用

「分子量」はすべての化学物質に対しても使用可能な用語ではない。構成単位を分子として明確に決めることのできない塩化ナトリウムの化学式量を「分子量」と表現しないように、ピルビン酸デヒドロゲナーゼ複合体やヒストン、リポソームなどの分子複合体の大きさを「分子量」を使って表現することはできない。分子量は文字通り「分子」を対象に定義された概念であり、分子を超えた分子複合体に対して定義された概念ではない。これが許されるのであれば「マウスの分子量」という表現が許されることになる。

還元剤やSDSを使用せず、分子間の相互作用を残した状態で電気泳動した場合、タンパク質の複合体として泳動されている可能性もある。得られたバンドが単一の分子種から構成されている保証はない。それゆえ、言葉の定義の問題ではあるが、このような方法で得られた泳動像から「分子量」を概算できないこともある。バンドの位置から試料の分子サイズを概算する場合、「分子量」よりも「質量」として表示するほうが無難である。

Daの起源

分子量の単位として誤使用されている“kDa”は、質量の単位である。1 kDaは1 Daの1,000倍の単位であるが、“Da”という単位が提案されたのは1924年⁶⁾、まだ酸素が原子質量の基準元素であった時代である。90年近い歴史を持つ単位ではあるが、単位を統括する国際機関が“Da”を承認し、正式に定義を定めたのは、2006年に発行された国際単位系(SI)国際文書第8版^{4,5)}によってであり、意外に最近のことである。それまで“Da”は、国際単位系（SI）において使用が認められていない科学的な位置づけの低い慣用的な単位の一つに過ぎなかった。

「daltonダルトン」の単位名は、原子説を提唱した英国の化学者John Dalton（1766–1844）に由来している。J. Daltonは原子説を提唱する際、原子量（相対原子質量）の概念を導入し、1805年初めての原子量表を発表した。J. Daltonが導入した原子量の基準元素は現在と異なり水素であり、水素の原子量を1としていた。原子量なので、その数値に質量の単位をつける必要はないが、原子や分子の質量の基準となる単位がdaltonと名づけられたことは、彼のこうした業績に因んだものと思われる。人名の“Dalton”は固有名詞で大文字から表記するが、単位名の“dalton”は一般名詞として扱い、原則として小文字から表記することが定められている。

“Da”は単位の記号であり、単位の名称は“dalton”。日本語では「ダルトン」もしくは「ドルトン」と表記される。生物学辞典⁷⁾や生化学辞典⁸⁾の表記は「ドルトン」であり、化学者J. Daltonの日本語表記も「ドルトン」が多い。しかし、2006年国際単位系（SI）国際文書第8版日本語版⁵⁾に「ダルトン」と記されたので、以後単位のほうの正式な日本語表記は「ダルトン」となる。

Daの定義

単位ダルトンは、複数の学会や学術誌、用語集などによって定義が与えられていたが、定義文や単位記号が不統一で、やや混乱していた。2006年、国際単位系（SI）国際文書第8版^{4,5)}によって正式な定義が与えられた以上、科学的な混乱を避けるためには、この単位を国際的な定義とルールにのっとって使用する必要がある。国際単位系（SI）国際文書第8版日本語版⁶⁾には「単位ダルトン（Da）は、静止して基底状態にある自由な炭素原子¹²Cの質量の1/12に等しい質量」と定義されている。さらに「大きな分子の質量を表す場合あるいは原子分子の小さな質量差を表す場合に、しばしばSI接頭語と組

み合わせて、キロダルトン：kDa, メガダルトン：MDa, あるいはナノダルトン：nDa, ピコダルトン：pDaなどの単位と記号が使われる」と記されている。

国際単位系 (SI) 国際文書第8版では単位の定義とともに単位記号も定められている。すなわち単位ダルトンの記号は“Da”である。そしてキロダルトンは“kDa”と表記しなければならない。いくつかの文献では“kD”や“KD”と表記されているが、大文字のD一文字をダルトンの単位記号として用いることは国際単位系 (SI) の規則に反している。「分子量66 kD」という表記 (図1レーン4) は、無次元量である分子量に単位をつけていることに加え、単位記号も適正に使用されておらず、二重に誤りをしていることになる。著名なメーカーのカatalogや商品の説明書にも見かける表記法ではあるが、真似をすべきではない。「分子量66KD」という表記 (図1レーン5) は、さらに、小文字で表記すべき「キロk」を大文字で表記する誤りが重ねられている。

おわりに

筆者が大学に進学し、バイオの勉強を始めたころに購入した生物学辞典第3版⁷⁾ (1983年発行) や生化学辞典第1版⁸⁾ (1984年発行) の「ダルトン」の解説には、分子量にダルトン (ドルトン) の単位をつけて表記することは誤用であると記述されている。この誤用の歴史は長く、現在では、報道機関が「放射能」を誤用するがごと

く誤用例が膨大に存在し、初学者が誤用に気づきにくい状態になっている。生物学辞典や生化学辞典に加え、1998年に新たに発行された分子生物学辞典⁹⁾にも同じ注意喚起がなされているにもかかわらず誠に残念である。論文や試薬メーカーの表記法を信用する気持ちは理解できないわけではない。ただ、知らない英単語の意味を英和辞典で調べるように、初めて出会う単位の定義を、辞典を開いて確認すれば、現状のような誤用の拡散を防ぐことができるのではないだろうか。

科学者は、実験結果として得た数値に責任を持たねばならないことはいうまでもない。数値に責任を持つことは単位にも責任を持つことではないだろうか。

文 献

- 1) <http://www.chemistry.or.jp/international/atomictable2012.pdf>
- 2) Berglund, M. & Wieser, M. E.: *Pure Appl. Chem.*, **53**, 397 (2011).
- 3) 化学大辞典, p.1036, 東京科学同人 (1989).
- 4) Le Système international d'unités (SI), 8^e édition/The International System of Units (SI), 8th edition, Bureau international des poids et mesures (2006). http://www.bipm.org/utis/common/pdf/si_brochure_8.pdf
- 5) 国際単位系 (SI) 国際文書第8版 (2006). <http://www.nmij.jp/library/units/si/R8/SI8J.pdf>
- 6) Tanner, H. G., *Science*, **59**, p.460 (1924).
- 7) 岩波生物学辞典 (第3版), p.935, 岩波書店 (1983).
- 8) 生化学辞典 (第1版), p.891, 東京科学同人 (1984).
- 9) 分子生物学辞典 (第1版), p.891, 東京科学同人 (1984).