

メタボロームデータベース



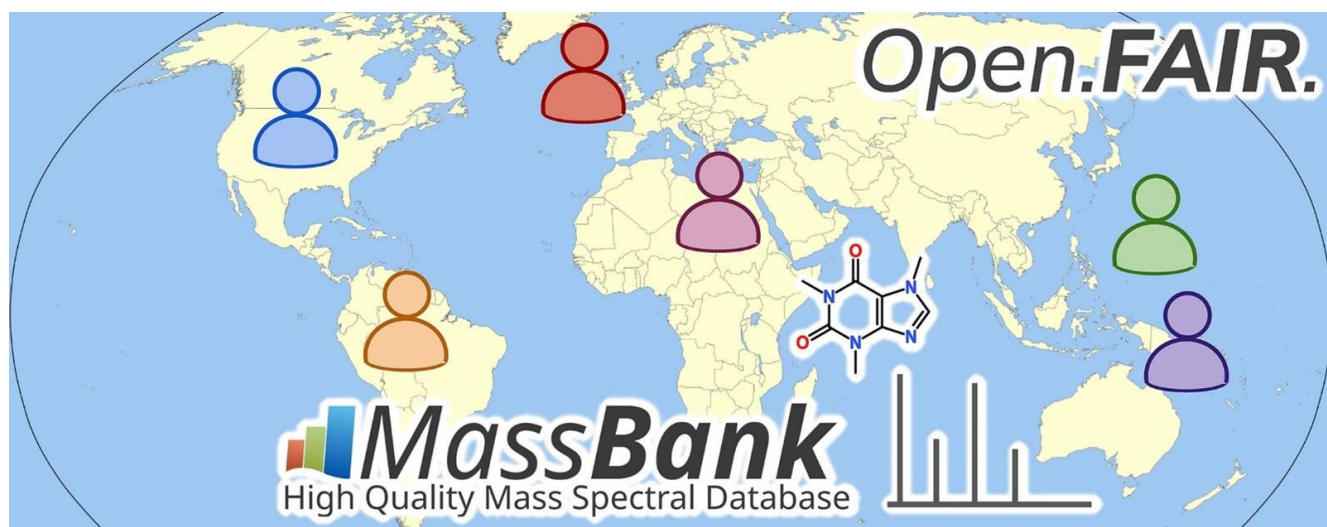
MassBank

<https://massbank.jp/MassBank/>



MassBankはNBDCの前身事業であるバイオインフォマティクス推進センターのBIRD事業の支援によって構築され、オープンソースかつオープンアクセスの質量スペクトルライブラリとして2006年に日本で誕生しました。その後、日本質量分析学会（MSSJ）の支援を受けて運営されています。2011年には、ドイツのNORMAN協会の支援を受けて欧州にMassBank専用サーバーが稼働しており、環境関連化合物のスペクトルなども追加され、現在、世界中の研究者から登録された18,529化合物のスペクトル、計119,845件の質量スペクトルデータが提供されています。

MassBankは、MassBank of North America、Global Natural Product Social Molecular Networking、PubChem、米国EPA CompTox Dashboard、NORMAN Database System、RforMassSpectrometryなど、複数のリソースとも相互に連携し、国際的なメタボローム質量スペクトルライブラリとして、世界中の研究者から広く使われています。



Shin-MassBankプロジェクト

生体試料から得られたプロダクトイオン（MS2）スペクトルを蓄積するための新しいデータ処理パイプラインの開発を目指しています。

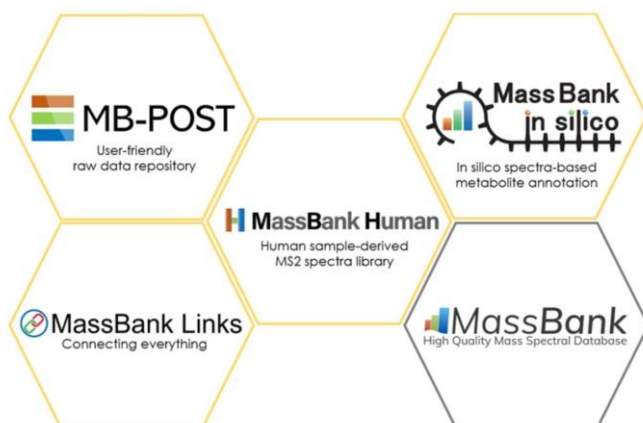
このパイプラインは3つのデータベースで構成されています。**MB-POST**は、使いやすい生データリポジトリです。**MassBank Human**は、ヒトメタボロームデータセットから得られたMS2スペクトルのライブラリです。**MassBank in silico**は、インシリコデータを用いた代謝物アノテーション機能を提供します。

Shin-MassBankプロジェクトは、MassBankコンソーシアムの一員であり、日本質量分析学会スペクトルデータ部門と連携しています。

参考文献

1. Steffen Neumann *et al.*, MassBank: an open and FAIR mass spectral data resource. *Nucleic Acids Research* (DOI: 10.1093/nar/gkaf1193/8321203)

Shin-MassBank



国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）
情報事業部 NBDC事業推進室

Tel: 03-5214-8491 E-mail: nbdc-dicp@jst.go.jp



Creative Commons 表示4.0国際ライセンス

(2026年5月)

メタボロームデータ解析パイプライン



Shin-MassBank

<https://shin.massbank.jp/>



Shin-MassBank

MB-POST

生体サンプル由来の生マススペクトルデータレポジトリ。高速ファイル転送機能と使いやすいインターフェースを実装しています。MB-POSTにデータ登録すると、論文投稿に必要な固有識別番号が付与されます。

MassBank Human (現在、β版を公開中)

MB-POSTに集積した生体由来の代謝物のマススペクトルデータを再解析し、高品質スペクトラムデータを集積します。

MassBank in silico (現在、β版を公開中)

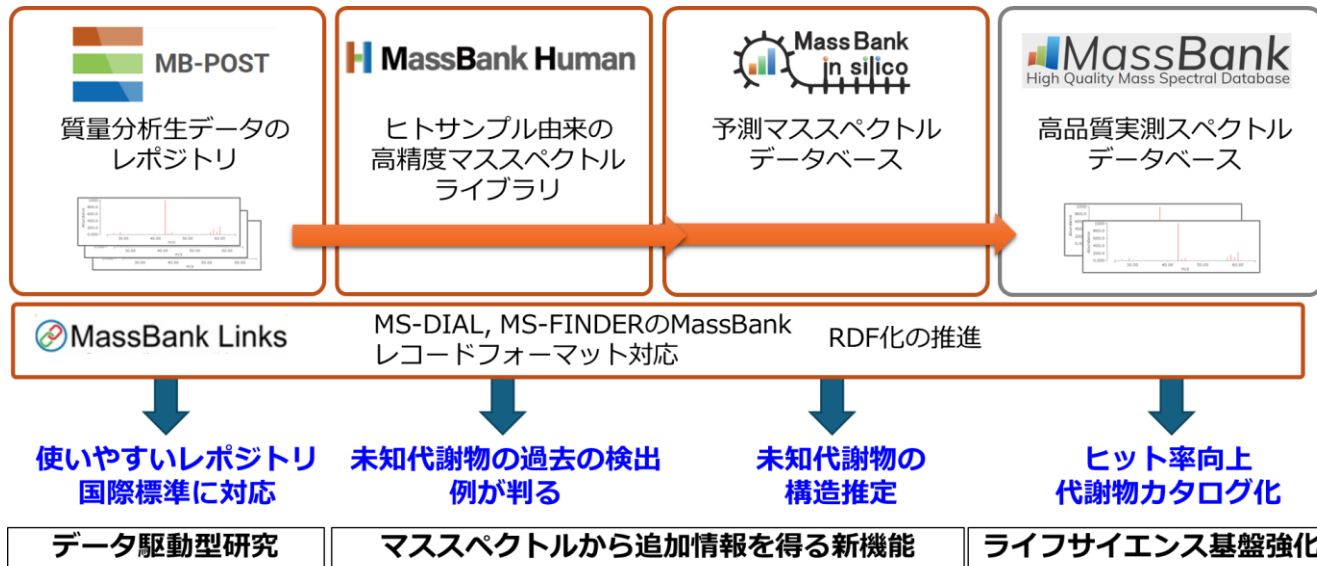
化合物構造からin silico予測したマススペクトルのライブラリ。生体内代謝物から網羅的に予測スペクトルを生成します。

MassBank Links

MB-POSTとMassBankの連携および他のデータベースを繋ぐポータル。MS-DIALやMS-FINDERから抽出された代謝物テーブルやマススペクトルをRDF化して提供します。

MassBank

現在、日本質量分析学会(MSSJ)の支援を受けて運営されています。2011年にドイツのNORMAN協会の支援を受けて欧州にMassBank専用サーバーが稼働、環境関連化合物のスペクトルなども追加されて、世界中の研究者から登録された18,529化合物のスペクトル、計119,845件の質量スペクトルデータが提供されています。



Shin-MassBankは「統合化推進プログラム」の研究開発課題「次世代低分子マススペクトルデータベース シン・マスの構築」(研究代表者: 松田史生 大阪大学 大学院情報科学研究科 教授)の一環として開発・運営されています。

参考文献

1. Steffen Neumann *et al.*, MassBank: an open and FAIR mass spectral data resource. *Nucleic Acids Research* (DOI: 10.1093/nar/gkaf1193/8321203)



国立研究開発法人科学技術振興機構 (JST)
情報事業部 NBDC事業推進室

Tel: 03-5214-8491 E-mail: nbdc-dicp@jst.go.jp



Creative Commons 表示4.0国際ライセンス

(2026年5月)