

【政策等】

仮訳

NIST が未知の物質を同定する「化学的指紋」のライブラリを拡充（米国）

2026 年 6 月 9 日

- ・ 米国立標準技術研究所(NIST) が、その最大規模の化学的指紋ライブラリに数万件もの新たな化合物を追加。登録済み化合物の総数は数十万件にまで増加した。
- ・ 研究者や製造業者は、食品、医薬品、化粧品、環境、体液や法医学的証拠、さらには宇宙の岩石中に存在する未知の化合物の同定に同ライブラリを活用している。
- ・ 夫々の化学的指紋は、物質をイオン化し、荷電した断片に分解してその物質を同定する質量分析計を用いて生成される。



NIST の質量スペクトルデータベースで分析された化学物質の一部が入ったバイアル。
写真提供: T. Mak/NIST

不明な化合物に悩まされる研究者であっても、また、未知の物質に困惑する製造業者であっても、頼ることのできる優れた手段がある。それは、NISTが数十年にわたって維持している、質量スペクトルとして知られる化学的指紋のライブラリである。

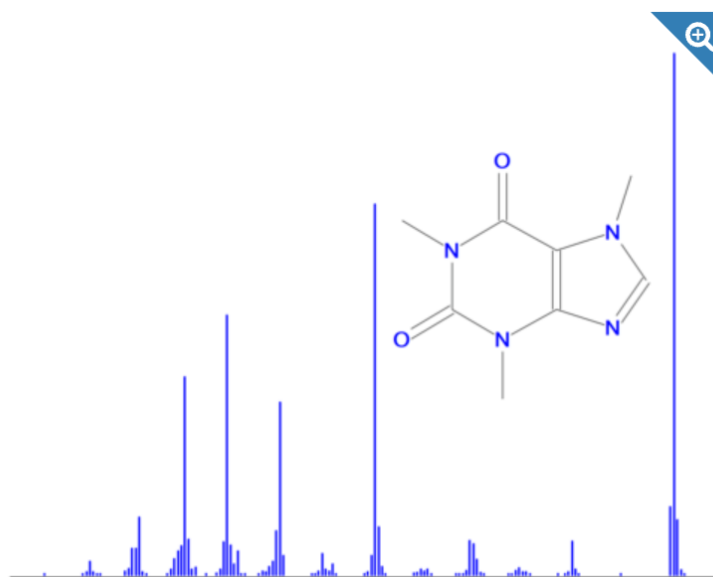
今回、NISTはこのライブラリの最新版を公開した。1988年以来、産業界の専門家や法医学者等が、食品、医薬品、化粧品、環境、さらには宇宙の岩石中に存在する未知の物質を同定するためにこのライブラリを利用している。

正式には [Standard Reference Database 1A](#) と呼ばれるこの拡充されたライブラリには、数十万種類の化合物から測定された質量スペクトルが収録されている。

NISTの研究者らは、化合物をイオン化して荷電した断片に分解し、質量電荷比に基づいてそれらの断片を分類する装置である質量分析計を用いて化学物質の指紋を作成する。これにより、特定の化学物質に固有の質量スペクトルとして知られる棒状のグラフの作成に十分な情報を得ることができる。

研究者らや製造業者らは、質量分析法を用いて未知の物質の棒グラフを作成し、それを NIST ライブラリと照合して一致する物質を同定することができる。

「DNA をデータベースと照合することで個人を同定できるように、化学物質の質量スペクトルを NIST データベースと照合することで、それを同定することができるのです」と、NIST 質量分析データセンターのグループリーダーである Bill Wallace 氏は説明する。



カフェインの化学的指紋を示す棒グラフ。この指紋の作成には、質量分析計を用いてカフェイン分子を荷電した断片へと分解し、それらを質量電荷比に基づいて分類する。各ピークの高さはその断片の相対的な存在量を示す。

一般的に NIST26 と呼ばれるこの NIST 質量スペクトルライブラリは、市販の多くの質量分析計にプリインストールされている。ユーザーは、機器メーカーまたはその他の[独立系販売代理店](#)から最新のライブラリを購入することができる。

NIST の科学者らは、数十年にわたる経験に基づいた包括的なソフトウェアベースの評価プロセスを採用することで、最新のライブラリが NIST の基準を満たすことを保証している。

世界最大級の質量スペクトルデータベースの一つである NIST26 ライブラリは、2 つの主要な構成要素から成り立っている。[Electron Ionization\(EI\)ライブラリ](#)には、容易に気化する化合物の化学的指紋が収録されている。このライブラリには約 35,000 種類の新規化合物が追加され、合計で 382,180 種類を超える。[Tandem ライブラリ](#)は、液体に溶解する非揮発性化合物の同定に使用される。このライブラリには 17,000 種類の新規化合物が追加され、合計で 68,635 種類の物質が登録されている。



未知の化学化合物の同定に科学者らが使用する実験装置の質量分析計に試料を注入する NIST の研究者。

写真提供: D. Anderson/NIST

NIST ライブラリの新バージョンには、以下の化合物が追加されている：

- ・ マイナーカンナビノイド：大麻に含まれる微量化学物質で、鎮痛剤等の医療用途が研究されている。
- ・ ニタゼン：強力なオピオイドの一種で、薬物過剰摂取による死亡例との関連性が高まっている。
- ・ チオフェン：NASA のキュリオシティローバーが発見した環状の硫黄含有有機分子の一種で、火星における古代生命の痕跡である可能性が指摘されている。
- ・ アルキル化多環芳香族炭化水素(PAHs)と呼ばれる複雑な有機化合物：地球近傍小惑星ベンヌの塵から発見された。PAHs は、生命に必要な化学物質の一部を誕生間もない地球にもたらした可能性がある。
- ・ セロトニンとドーパミンの植物由来誘導体である N-(p-クマロイル)セロトニンと N-メチルドーパミンは、抗酸化作用と抗炎症作用を持つことから、治療薬としての可能性が研究されている。
- ・ 環境中に存在する「永久に残る化学物質」と呼ばれる、一連のパーフルオロアルキルおよびポリフルオロアルキル化合物(PFAS)。

詳細については、質量分析データセンターの最新ウェブサイト chemdata.nist.gov を参照のこと。

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、米国立標準技術研究所(NIST)の記事 “NIST Expands Its Library of ‘Chemical Fingerprints’ to Identify Unknown Substances”

(<https://www.nist.gov/news-events/news/2026/06/nist-expands-its-library-chemical-fingerprints-identify-unknown-substances>) を翻訳したものである。