

2018年度日本質量分析学会

功 勞 賞

西岡孝明 氏 [京都大学, 農学博士]



西岡孝明氏は、1999年から始まったポストゲノム特定領域研究の計画研究者として、含窒素代謝物やリン酸化代謝物などのメタボロミクス研究を目的としてキャピラリー電気泳動-質量分析 (CE-MS/MS) の開発に着手した。2001年4月に新設された慶應義塾大学先端生命科学研究所教授に招聘され、CE-MS/MS技術を完成させて微生物や植物に応用し、メタボロミクス研究で世界をリードした (2001~2005年)。1990年代には、ESIなどのイオン化法が実用化され、さらに異なるタイプの分析装置を組み合わせたハイブリッド型タンデム質量分析も利用され始めていたが、多様なユーザーを対象とした spectral library を大規模に作成することはもはや困難だった。「多様なタイプの分析装置が利用されている」と「分析条件を標準化できない」という二つの壁を乗り越えてマススペクトルのデータベースを構築することを目的として、①自前の分析機器を持たず、マススペクトルを収集する「入れ物」(public repository) だけを開発、提供する、②その入れ物に世界中の研究者からマススペクトルを提供してもらい、③集まったマススペクトルを spectral library として研究者 (ユーザー) に提供する、という新しいコンセプトに基づく MassBank プロジェクト (研究代表者・西岡孝明) を提案し、科学技術振興機構バイオインフォマティクス推進事業の研究開発課題に採択された (2006年4月から2014年3月)。

MassBank に収録するデータ (= レコード) は、マススペクトル (m/z と強度値) だけでなく、質量分析に用いた詳細な測定パラメータや分析装置タイプ、分析した化合物の化学構造情報を記述したメタデータも必須項目とすることによって、実験データとしてのマススペクトルの再現性、信頼性を担保した。同一化合物について、異なる研究グループが異なる分析装置で測定したマススペクトルを提供することによって、化合物あたり5~50件のデータが冗長に MassBank に蓄積されている。2017年2月現在、MassBank には世界の34研究グループが提供したESIをはじめ6イオン化、27分析計タイプで分析した約13,000化合物、46,979件のマススペクトルが公開され、多くのユーザー (2015年度ユニークアクセス数は36万1千件) が利用している。MassBank を引用した論文733件 (Google Scholar; 2011年1月~2017年8月の合計) から、MassBank は生物学、薬学、農学、環境科学などの分野で利用されていることがわかる。

各レコードは提供した研究者の著作物と定義され、コピーしたマススペクトルの取り扱いを著作権者が Creative Commons License で指定する。これによって MassBank データは誰でも無料で自由にダウンロードして、改変、利用することが可能になった。さらに MassBank システムの Windows 版と Linux 版を作成して無料で配布した。企業では社内 LAN 上に MassBank システムを構築して、ダウンロードしたマススペクトルと社内で測定したマススペクトルを併せた社内版 MassBank データベースを構築することが可能になった。これを契機として MassBank はまたたくまに世界中に拡散、普及した。

MassBank プロジェクトでは spectral library を検索するためのさまざまな検索ツールを開発してユーザーに提供している。さらに、プロジェクト内研究として、高分解能マススペクトルのピークデータを m/z ではなくて、イオンの化学式に置き換えた化学的に誤差のないマススペクトルを開発して、spectral library としての提供を検討している。2011年には、約600化合物のESI-QTOF-MS/MSデータで観察された5,698ピークの化学注釈 (chemical annotation) を行ったデータベースを MediaWiki 上に構築した。それまで高分解能マススペクトルは「分析した化合物」の化学構造との関係を理解するために用いられてきたが、この化学注釈データベースを利用すると、「異なる化合物間」の部分化学構造の共通性とマススペクトルの関係を研究することができることが明らかになっている (2017年)。

MassBank の国際化を推進するために、データ提供から library 利用法、MassBank システムの LAN 上での構築方法などを解説した、100ページを超えるマニュアルを日本語版と英語版で提供している。MassBank.jp のミラーサーバ MassBank.eu がドイツに設置され (2012年)、EU の環境科学研究機関約70が参加する Norman Association とカナダ国 Agriculture and Agri-Food Canada のそれぞれ公式データベースとなっている。Norman Association が主催する MassBank ワークショップが2012、2014、2017年にEUで開催され、さらに米国 California 大学デービス校ゲノムセンターに MassBank of North America (MoNA) が設置されている (2015年)。これら MassBank グループが主導する Critical Assessment of Small Molecular Identification (CASMI) コンテストが2012年から開催され、第2回コンテストを日本質量分析学会スペクトルデータ部会の協力を得て実施した (2013年)。このコンテスト結果は、西岡孝明氏が Editor として発行した本学会誌 *Mass Spectrometry* 誌 vol. 3, 特別号 (2014年) にまとめられている。

功 勞 賞

2008年8月からMassBankは日本質量分析学会の公式データベース（現在は、本学会が「公認する」データベース）に認められた。さらにマススペクトルの品質監修やデータベース化に関する専門的助言と支援を受けることを目的として、本学会内にスペクトルデータ部会（2012年）とMassBankデータベース構築委員会（2016年）が設置された。関西談話会や関東談話会でMassBankの利用方法の講習会を開催するとともに、国際会議（IMSC2012）ではMassBankに関するワークショップと日本語プログラムを開催している。

以上のように、西岡孝明氏は長年にわたり、質量分析のデータベース構築、開発、維持に従事し、質量分析の進歩発展および普及に継続して寄与しており、日本質量分析学会功労賞の受賞者としてふさわしいものとして、贈呈を決定した。