



MSデータベースカタログ 2026.6

GC-MS & LC-MS データベース

Wiley Registry / NIST Mass Spectral Library 2023	GC-MS/LC-MS 解析向けの包括的な質量スペクトルライブラリー	2
NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023	EI・MS/MS スペクトルと RI 情報を収録した標準的 MS ライブラリー	3

GC-MS データベース

Wiley Registry of Mass Spectral Data 2026	GC-MS 非ターゲット分析を支援する大規模スペクトルデータベース	4
Mass Spectra of Designer Drugs 2026	新規精神活性物質や関連化合物の同定を支援する GC-MS ライブラリー	5
MMPW GC-MS Library	薬物・毒物・代謝物分析向けの GC-MS 毒性学ライブラリー	6
Flavors and Fragrances Library	香料・フレーバー化合物の同定を支援する GC-MS ライブラリー	6
Pesticides Library with LRI	農薬分析の信頼性を高める LRI 付き GC-MS ライブラリー	7
FAMES Library	脂肪酸メチルエステル分析向け GC-MS ライブラリー	7
LIPIDS Database	脂質様分子の GC-MS 分析を支援するライブラリー	7
Isidorov GC-MS Library	生物・環境分野の TMS 誘導体化合物向け GC-MS ライブラリー	8
Geochemicals / Petrochemicals / Biomarkers	地球化学・石油化学・バイオマーカー化合物向けライブラリー	8

LC-MS データベース

LC-HR-MS/MS Library	薬物・毒物・代謝物の LC-HR-MS/MS スクリーニング用ライブラリー	9
LC-MSn Library	代謝物ベースの薬毒物 LC-MSn スクリーニングライブラリー	9
Wiley Tandem MS Data – MS for ID	小分子同定向けの LC-MS/MS タンデム質量スペクトルライブラリー	9

GC-MS 対応フォーマット一覧

10

LC-MS 対応フォーマット一覧

11

WILEY

GC-MS & LC-MS データベース

Wiley Registry / NIST Mass Spectral Library 2023



信頼性の高いスペクトル解析に不可欠な GC-MS ライブラリー

Wiley Registry of Mass Spectral Data 2023 と NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023 がセットになった、最も広範なマススペクトルライブラリーです。300 万件を超えるスペクトルデータ (EI、LC-MS を含む) を利用できます。NIST 単独と比べて大幅に広い化合物カバレッジを提供し、未知化合物の同定における候補の見落としと低減に貢献します。より多くのデータに基づいた、確信の持てる化合物同定を支援します。

- ターゲット分析および非ターゲット分析に使用できる幅広い化合物 - 包括的なデータセットにより、同定の速度と可能性の両方が向上します。
- 米国、中国、日本、ヨーロッパを含む世界の特許への対応範囲を拡大し、ラボを最新の状態に維持します。
- スペクトルレコードには、結果をさらに絞り込むのに役立つ物理的特性、構造、その他のフィールドなどの検索可能な追加情報が含まれています。
- データは、信頼できる結果の品質基準を満たしていることを確認するために、Wiley の社内および社外の専門家によって慎重に厳選およびレビューされます。
- スペクトルは、重複スペクトルを含む個別のライブラリにセグメント化され、さまざまな実験室設定にわたる堅牢な検索が可能になります。
- 互換性の心配はありません。最も一般的なメーカーのファイル形式で利用できるため、利用中のソフトにて作業できます。
- NIST 2023 ソフトウェア (MS Search、AMDIS、MS Interpreter) が含まれています。

ライブラリの仕様

データタイプ	GC-MS	LC-MS
	Wiley Registry/ NIST 2023*	NIST MS/MS 2023
スペクトル	1,180,800	2.3M+
化学構造式	1,148,600	1.4M+
ユニーク化合物	950,200	51,500

*Wiley Registry と NIST GC-MS データを合計し、重複部分を差し引いたもの。

化合物の範囲

各化合物の収録の有無については、www.spectrabase.com から検索・確認ができます。



NIST / EPA / NIH Mass Spectral Library 2023



より広範囲な化合物に対応。

世界で最も信頼されている MS スペクトルライブラリのひとつです。米国国立標準技術研究所（NIST）の経験豊富な質量分析チームにより開発され、50 年以上にわたり包括的な評価と拡張が続けられています。電子イオン化（EI）および MS/MS スペクトルのライブラリ。NIST 2023 Software（MS Search, AMDIS, MS Interpreter）が付属されています。

ライブラリー仕様

Electron Ionization (EI) Library

- スペクトル：394,000
- 化学構造式：347,100
- ユニーク化合物：341,600
- 全 EI の化合物に対する AI-RI 値

様々な装置メーカーのファイルフォーマットで提供

GC Retention Index (RI) Library

- RI 値：491,700
- ユニーク化合物：180,600

Tandem MS (MS/MS) Libraries

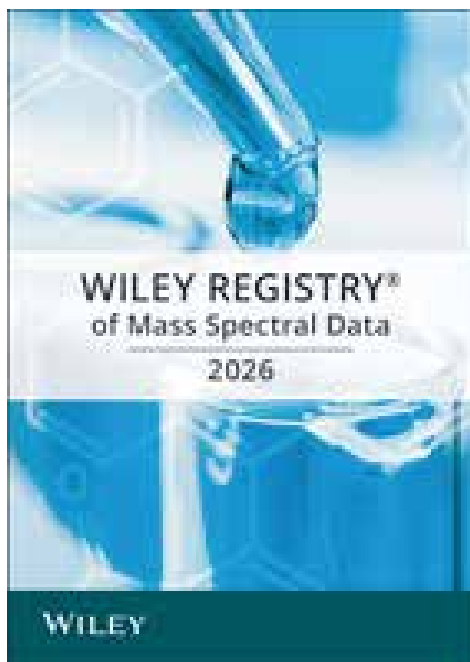
- スペクトル：2.3M+
- 化学構造式：1.4M+
- ユニーク化合物：51,500
- プレカーサーイオン：399,200

NIST 2023 は主要装置メーカー形式に対応しており、GC-MS 解析を行うラボにとって重要なデータベースです。追加データベースとの組み合わせにより、より包括的な化合物カバレッジと、ワークフローの最適化・自動化を支援します。

GC-MS データベース

Wiley Registry of Mass Spectral Data 2026

New



GC-MS 解析を、より迅速に、より確実に

フィールドテストを経て構築された Wiley Registry[®] of Mass Spectral Data は、市販されている最大級のマススペクトルライブラリーです。掲載されている化合物数は、競合他社のライブラリーの 2 倍以上に上り、915,500 件以上のスペクトルが収録されています。GC-MS のノンターゲットスクリーニングや MS-TOF を用いた精密質量分析のためのワークフローなど幅広いアプリケーションにてご利用いただけます。

- ターゲット分析および非ターゲット分析に使用できる幅広い化合物 - 包括的なデータセットにより、同定の速度と可能性の両方が向上します。
- 米国、中国、日本、ヨーロッパを含む世界の特許の対象範囲を拡大。
- 可能なものには、スペクトルに加えて、物理的特性、DOI、構造などの追加情報が収録されており、結果に対する最大限の可能性を提供できます。
- データは、信頼できる結果を提供するための品質基準を満たしていることを確認するために、Wiley の社内および社外の専門家によって慎重に精選およびレビューされています。
- 重複する化合物からの様々なスペクトルを含む、いくつかの個別のライブラリーにスペクトルは分けられており、様々な装置設定でも堅牢な検索が可能です。

付加情報

スペクトル分析は、データが多ければ多いほど有利です。Wiley スペクトル データベースは、単なるスペクトルよりはるかに多くの情報を提供します。データベース レコードには、レコードとして利用可能な場合、次の貴重な詳細が含まれます。

- 化学構造式 • 化合物名 • 精密質量 • 分子量 • 組成式 • InChI/InChIKey • 予測 Kovats RI 値
- Quality Index (QI) • Splash IDs • Digital Object Identifier (DOI) • Wiley ID

各バージョンと NIST の比較

	WR26	WR12	WR11	WR10	WR9	"NIST2023 (EI spectra)"	"NIST2020 (EI spectra)"	"NIST2017 (EI spectra)"	"NIST2014 (EI spectra)"
Mass Spectra	915,500	817,200	775,800	719,400	662,860	394,000	350,000	306,600	276,200
Searchable Structures	883,300	785,000	741,200	684,700	565,106	347,100	350,000	306,600	276,200
Unique Compounds	743,100	668,400	632,500	583,700	476,553	341,600	306,000	262,100	237,400

著者について

Dr. Einar August Stenhagen, Fred McLafferty, Sixten Abrahamsson のコラボレーションによって誕生した Wiley Registry は、質量分析におけるスペクトルデータの使用の先駆けとなりました。スウェーデン王立科学アカデミーの会員である Sixten Abrahamsson は、X 線結晶学者であり、そのグループは生物学的に活性な分子の構造と機能を研究していました。米国科学アカデミーの会員である Fred McLafferty は、トップダウン分析とマクラファティ再配列で知られる質量分析の第一人者でした。スウェーデン王立科学アカデミーの会員である Einar Stenhagen は、妻の Stina Ställberg-Stenhagen と共に、ガスおよび液体クロマトグラフィーと質量分析の組み合わせを可能にするジェット セパレーターを発明しました。

2009 年以来、Wiley Registry は Wiley Science Solutions データ チームによって維持および更新されています。

Mass Spectra of Designer Drugs 2026 New



世界的なオピオイド問題への対応を支援する GC-MS データベース

デザイナードラッグは急速に変化・多様化しており、迅速かつ確実な同定には、常に最新のスペクトルデータへのアクセスが不可欠です。

Mass Spectra of Designer Drugs は、毎年更新される、デザイナードラッグおよび関連化合物を対象とした包括的な GC-MS ライブラリです。法科学、臨床、毒性学分野のラボにおいて、違法薬物や新規精神活性物質の迅速な同定を支援する重要なデータベースとして活用されています。

ライブラリには、27,900 種類以上の化合物に対する 37,075 件の質量スペクトルを収録。新規精神活性物質（NPS）を含む幅広い化合物について、化学構造や詳細情報を提供します。データは公的文献および地下流通情報の双方をもとに収集され、世界各国の犯罪捜査機関や協力機関と連携して構築されています。また、可能な限り既存の標準ライブラリによる検証とスペクトル解析確認が行われています。

2026年版では、700件以上の新規スペクトルと、400 種類以上の新規化合物を追加。ニタゼン系、フェンタニル系、各種オピオイド、合成カンナビノイドなど、最新の薬物動向に対応しています。

主な特長

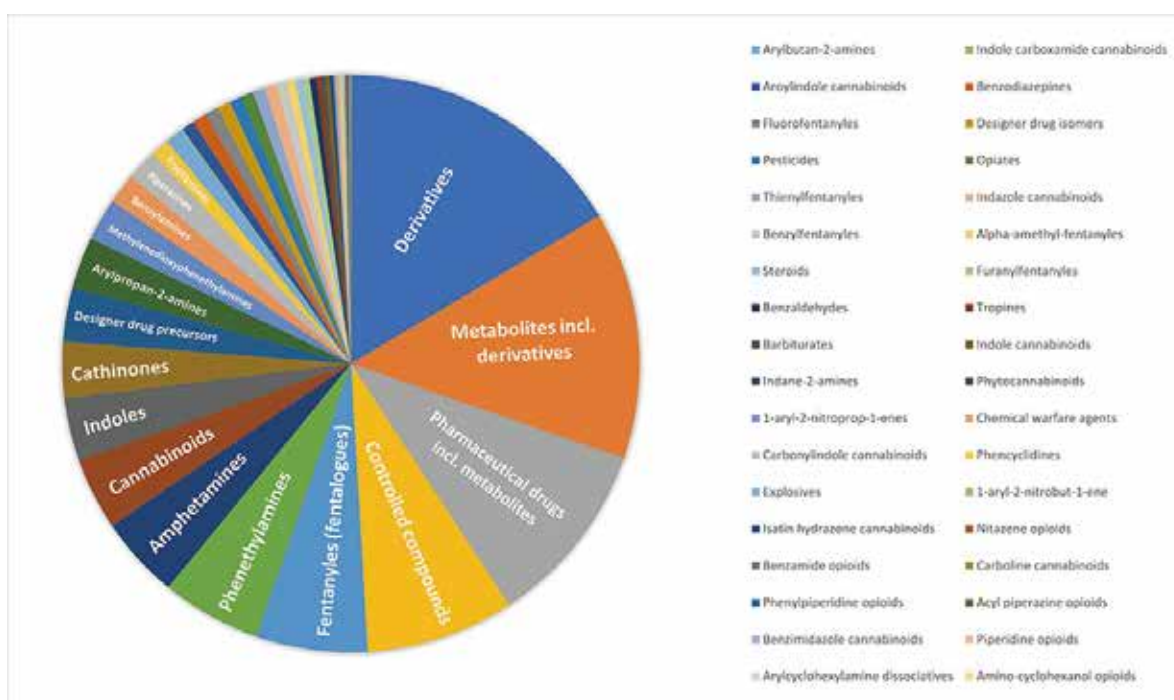
- ・幅広い化合物カバレッジによる迅速な同定支援
- ・専門家による厳格なデータレビュー
- ・多様な MS 装置・ベンダーフォーマットに対応
- ・既存ワークフローへのシームレスな統合

主な用途

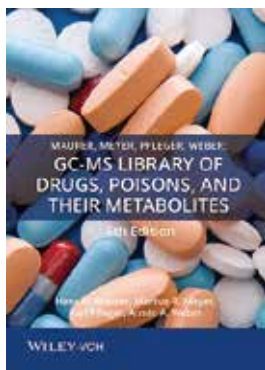
法科学・臨床・毒性学ラボにおける違法薬物分析、犯罪捜査支援、検視・国境管理・薬物監視など、幅広いフォレンジック分析用途で活用されています。

化合物の範囲

最も包括的であり、フェンタニル、オピオイド、幻覚剤、抗うつ薬、精神安定剤、カンナビノイドなどのクラスをカバーする医薬品および市販薬が含まれています。



Maurer, Meyer, Pflieger, Weber: GC-MS Library of Drugs, Poisons, and Their Metabolites 6th Edition



臨床毒性学および法医毒性学研究者向けの必須リファレンス

臨床毒性学および法医毒性学の研究者を対象とした最も包括的なリファレンスである Maurer Meyer Pflieger Weber (MMPW) スペクトルデータベースには、分析毒性学において広く知られる Hans H. Maurer による実験データが収録され、化合物の同定支援のため、物質はすべて毒性学上のカテゴリーに従い分類されています。各種メソッドは、便利な PDF 形式でデータベースとともにご利用いただけます。

ドイツのザールランド州を拠点とする著名な毒性学研究団体に籍を置く Hans H. Maurer、Markus Meyer、Armin Weber によって開発・更新された Maurer, Meyer, Pflieger, Weber: GC-MS Library of Drugs, Poisons, and Their Metabolites 6th Edition は、GC-MS 同定において非常に高い評価を得ているスペクトルデータベースの1つで、薬物、毒物、その他の毒素、およびその代謝産物の同定において、毒性学者、法医学者、検死官、環境化学者から世界的に認知・信頼されています。

この広範なスペクトルコレクションには、精神作用物質、ほぼすべての関連治療薬、およびそれらの代謝物 7,800 以上を含む 175 のカテゴリーの化合物に関する 10,948 の高品質マススペクトルと GC 保持指標が掲載されています。

このスペクトルライブラリーは最も一般的な分析機器メーカーのフォーマットに適合し、薬物、毒物、その他の毒素の GC-MS 分析に携わる研究室にとっての必需品となっています。

Mass Spectra of Flavors and Fragrances of Natural and Synthetic Compounds, 3rd Edition



保持指標データを活用した、天然・合成化合物の高度な同定を実現

3,000 件以上の質量スペクトルに加え、LRI (Linear Retention Index) 保持指標データ、計算済み Kovats RI、さらに検索可能な化学構造情報を収録した、フレーバー・フレグランス業界向け GC-MS ライブラリーです。

天然由来および合成化合物に対応したこの先進的な質量スペクトルライブラリーにより、複雑な混合試料中に含まれる未知化合物の同定を、より迅速かつ高精度に行うことが可能になります。LRI (線形保持指標) などのクロマトグラフィー情報を用いて MS 検索結果を絞り込むことで、複雑な混合物におけるピークアサインの信頼性向上を支援します。

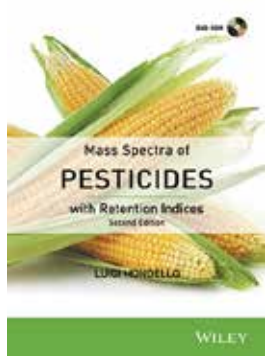
収録スペクトルは、標準的かつ広く知られたシンプルなマトリックス成分を基準として、Luigi Mondello 教授により GC-MS を用いた分離・同定を通じて取得・記録されています。

さらに、CAS 番号、一般名、CAS 名、分子量、化合物クラスなどの詳細情報も収録されています。

データベース仕様

- Spectra: 3,462
- Chemical Structures: 3,462
- Unique Compounds: 3,312
- RI1 = measured on SLB-5MS (Hydro): 3,462
- RI2 = measured on SLB-5MS (FAMES): 2,516
- RI3 = measured on Supelcowax-10 (FAMES): 1,466 (same records as RI4)
- RI4 = measured on Supelcowax-10 (FAEEs): 1,466 (same records as RI3)
- RI5 = measured on Equity-1 (Hydro): 646

Pesticides Mass Spectral Library With LRI, 2nd Edition

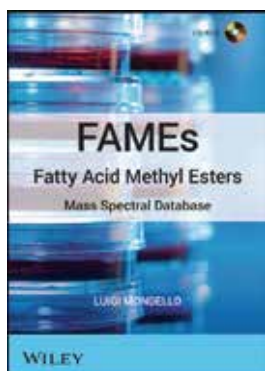


農薬分析の信頼性を高めるライブラリ

20 種類の異なるクラスに分類された農薬に含まれる 1,300 件の分子が収録されています。このエディションには、農薬に含まれる 342 件の新しい化合物、SLB-5ms カラムで得られた 1,300 件の LRI、および EQUITY-1 カラムで得られた 147 件の LRI が収録されています。GC-MS ベースのこの農薬ライブラリーは、複雑な混合物のピークを判断する際に大きな助けとなります。

標品および既知の単純なマトリクス成分に関連したマススペクトルは、Luigi Mondello 教授が GC-qMS にて分離および同定しました。CAS 登録番号、一般名、系統名、ノミナル質量（分子量として）、化学式、化学薬品クラス、および線形リテンションインデックスといった追加情報も記載されています。

FAMES: Fatty Acid Methyl Ester Mass Spectral Library



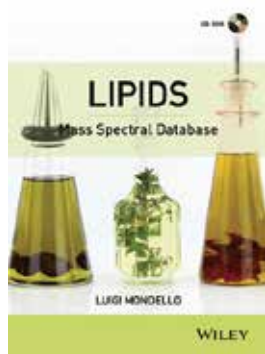
信頼できる化合物同定でより良い食品安全性分析を

脂肪酸メチルエステルの 240 件以上のスペクトルおよび化学構造式が収録されています。非極性カラムにアルカン混合物を、極性カラムに FAME（脂肪酸メチルエステル）および FAEE（脂肪酸エチルエステル）混合物を用いて得られた線形リテンションインデックスと Kovats リテンションインデックスの計算値も登録されています。リテンションインデックスデータが追加され、化合物マッチングおよび未知の化合物の同定の信頼度がより高くなりました。

LC-MS/MS など他の方法も使用できますが、このように高度に選択的な方法では標的化合物の情報しか検出されません。しかし GC/MS による広範な TIC スクリーニングでは、どんな情報ももれなく検出します。アプリケーションには、標的細菌（緑膿菌など）の以下を含む FAME プロファイルが含まれます。

- マススペクトル、検索可能な化学構造式、化学情報、および LRI リテンションデータを含むレコード
- 名称、分子量、保持時間で索引されたレコード
- 高度に管理：制御された条件で単一の機器で測定
- 主力なサプライヤーやメーカーから入手した高品質サンプル

LIPIDS Mass Spectral Database

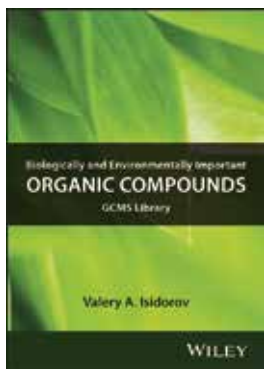


GC-MS 分析を加速

純粋な標品の 430 件の GC マススペクトルと、11 件の脂質クラス分類が登録されています。このデータベースは、複雑な混合物のピークを判断する際に大きな助けとなります。食品分析や臨床・医学へのアプリケーションなど、多くの研究分野において価値あるツールです。

430 件の脂質様分子に対する 1,400 以上の線形リテンションインデックス (LRI) は、3 つの異なる種類の固定相 (SLB-5ms, Equity-1, Supelcowax-10 (Supelco)) において、再現可能なクロマトグラフィー条件下で実験的に決定されました。また、LRI は異なるレファレンス混合物 (アルカン、脂肪酸メチルエステル (FAME)、脂肪酸エチルエステル (FAEE)) を用いて決定されています。CAS 登録番号、一般名、系統名、ノミナル質量 (分子量として)、化学式、化学薬品クラス、標品の供給元といった追加情報も記載されています。

Biologically and Environmentally Important Organic Compounds: GC-MS Library (Isidorov)



GC-MS 分析を加速

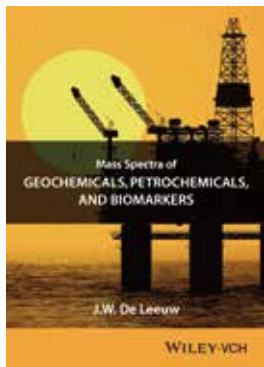
トリメチルシリル (TMS) 誘導体化された 1,800 を超える生物学的および環境的に重要な有機化合物のマスペクトルと、温度プログラムされた TMS 線形クロマトグラフィーリテンションインデックス (インデックス単位の範囲は 713 ~ 4700) が収録されています。特長として、著者のチームにより植物組織で検出された、これまで調査されていない物質 (例えば、セスキテルペノールのフェニルプロペノイド、桂皮酸のグリセリド) の分析パラメーターがあることが上げられます。IT 値が 4000 を超えるグリコシド、リグナン、フェニルプロペノイドグリセリドのような高沸点化合物の分析パラメーターを初めて公開しています。

他の主要な特徴:

- データが豊富な特性フィールド - 線形プログラミングされた RI (保持指標) とマスペクトルと共に、レコードには、CAS 番号、分子式および構造式、式量、化学名、別名などのようなフィールドが含まれています。
- 広範囲の用途での使用 - 環境化学、食品、食品香料および化粧品香料、医薬品化学、天然物、薬剤およびバイオテクノロジー、植物化学分析
- MS (質量分析) により今まで特徴づけられたことのない多くの化合物

著者について: Valery A. Isidorov 理学博士は、ポーランドのビャウイストク工科大学の教授で、分析化学、環境化学、および天然物化学を専門としています。

Mass Spectra of Geochemicals, Petrochemicals and Biomarkers (SpecData)



石油探査の最適化と、信頼性の高いバイオマーカー化合物の同定を支援

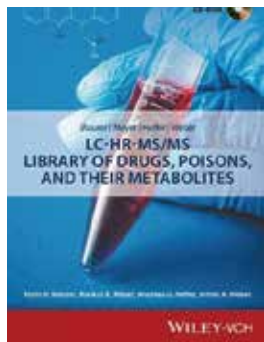
明確に定義された化合物に対する 1,093 件のマスペクトルを収録した有機化学者、地球科学者、および石油化学者向け高品質データベースです。化学構造は、必要に応じて、NMR 分光法や単結晶 X 線構造分析などのさまざまな手法によって解明されました。

収録されているスペクトルは、堆積性有機物中の耐性生体高分子の発現率および化石燃料の生成機序、ならびに地球圏の有機硫黄中の化学組成に関する膨大なプロジェクトにおいて収集されました。収録されているスペクトルは、Netherlands Institute of Sea Research (NIOZ) 海洋生物地球化学部門の J. W. de Leeuw らのグループにより測定されました。

物質は慎重に単離および精製されています。収録されている物質のクラスには、飽和芳香族炭化水素、不飽和芳香族炭化水素、硫黄および酸素を含む芳香族化合物、硫黄および酸素を含む非芳香族化合物、テルペン、ステロイド、およびその分解生成物があります。

LC-MS データベース

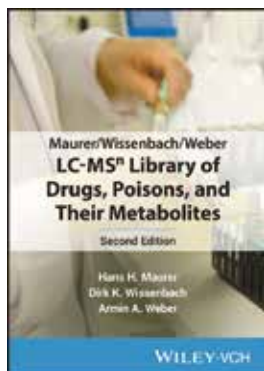
LC-HR-MS/MS Library of Drugs, Poisons and Their Metabolites



毒性学者 Hans H. Maurer らのチームが開発した Maurer/Meyer/Helfer/Weber LC-HR-MS/MS Library of Drugs, Poisons, and Their Metabolites には、2,000 件以上の親薬物 / 毒物および 3,000 件以上のその代謝物やアーチファクトに対する 95 件以上の化合物分類グループに分かれた 5,006 件のスペクトルが収載されています。この代謝物ベースのライブラリーにより、LC-MS 偽陰性結果のリスクを最小限にすることができます。

LC 高分解能タンデム質量分析 (LC-HR-MS/MS) は、高い多様性、感度、特異性といったスクリーニングアプローチにさまざまな利点をもたらします。このライブラリーは、さまざまな薬物クラスにおいて代謝物ベースのスクリーニング手順の基準としてご利用いただけます。このライブラリーに含まれるデータフィールドは、化合物名、実験式、分子の精密質量、前駆体の精密質量、極性、保持時間、CAS 登録番号、およびカテゴリーです。

LC-MSⁿ Library of Drugs, Poisons and Their Metabolites, 2nd Edition



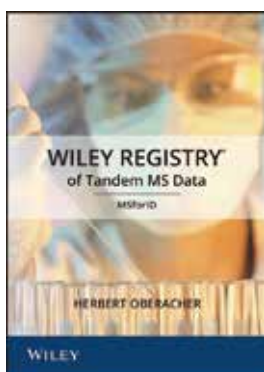
2,270 件以上の親化合物および 3,600 件以上の親化合物の代謝物に対する代謝物ベースの立証済み LCMSⁿ スクリーニング法および MS² および MS³ スペクトルを収載しています。このデータベースは、代謝物のスペクトルのみを焦点を置いた LC-MSⁿ スクリーニングライブラリーのひとつです。

このエディションは、法医学研究、臨床研究、ルーチン検査室において薬物、毒物、およびその代謝物を迅速かつ正確に確定・同定できるよう開発されました。代謝物の検出により感度、検出範囲、および選択性が高まり、体内通過を確認することができます。標的分析物によるイオンの抑制に起因すると考えられている LC-MS 偽陰性結果のリスクを最小限に抑えられます。代謝物パターンを考慮すると、擬陽性結果のリスクも減少します。

以下のものが含まれます。

- サンプル調製の方法
- 適用されたクロマトグラフィー条件

Wiley Registry of Tandem Mass Spectral Data – MS for ID



法医学、毒性学、および病理学分野の 1,000 件以上の化合物に対する 12,048 件のポジティブモードおよびネガティブモードのスペクトルが収載されています。違法薬物、医薬品化合物、農薬、およびその他の低分子生体有機分子などの分野を網羅したこのデータベースは、特異性が通常約 95% および感度が 92%¹ を超える小分子の同定に高い信頼度を示すツールです。

化合物はそれぞれ、the Institute of Legal Medicine, Innsbruck Medical University の Oberacher チームにより慎重に測定されました。一連の管理条件により、さまざまな設定において正確で信頼度が高く、再現性のある検索結果を得られるようになりました。このライブラリーは、使用するタンデム質量分析計にかかわらずデータを良好に適用できることを証明しています。

Wiley Registry of Tandem Mass Spectral Data:MS for ID は、LC-MS/MS 向けに開発された最も正確な検索アルゴリズムとセットになっており、迅速で再現性のある安定した検索結果が得られます。

¹ Oral Presentation, ASMS 2011. On the Development of a Robust and Transferable Tandem Mass Spectral Library for the Identification of Small Bioorganic Molecules. Birthe Schubert and Herbert Oberacher. Institute of Legal Medicine, Innsbruck Medical University, Innsbruck, Austria.

GC-MS 対応フォーマット一覧

		Wiley Spectral Database												
Supported Vendor / Software	Wiley Registry 2026	NIST 2023	Wiley Registry / NIST 2023	Designer Drugs 2026	Pesticides with LRI	Pesticides 2009	LIPIDS	Biological & Environmental Important Organic Compounds	Flavors & Fragrances 3rd Ed	FAMES	Volatiles in Food	Drugs, Poisons, & Their Metabolites (MMPW)	Geochemicals, Petrochemicals, & Biomarkers	Physiologically Active Substances
Agilent	ChemStation MassHunter OpenLab PCD	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓	
NIST	MS Search	✓	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓		✓	✓	
PerkinElmer	TurboMass/ SimplicityChrom	✓	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓		✓	✓	
Shimadzu	GCMSolution/ LabSolutions	✓	✓	✓	※1		※1	✓	※1	※1		✓	✓	
Thermo	Xcalibur GRAMS/Spectral ID TraceFinder Chromeleon Compound Discoverer	✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓		✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓		✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓	
Waters	MassLynx	✓	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓		✓	✓	
ACD/Labs	ACD/Spectrum				✓		✓		✓ ND9	✓				
Bruker	MS Workstation	✓	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓		✓	✓	
Chromatec	Analytic	✓	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓		✓	✓	
Leco	ChromaTOF	✓	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓		✓	✓	
JEOL	msFineAnalysis	✓	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓		✓	✓	
Scienc	MS Workstation	✓	✓	✓	✓		✓	✓	✓	✓		✓	✓	
Chromatoplus									30-day trial					
Wiley	KnowItAll	※2	※3	※3	※2	※4	※2		30-day trial		※2	✓	※3	※2

✓ = compatible with the NIST software

※1 島津製作所からのみ提供

※2 KnowItAll MS サブスク립ションオプションに含まれる

※3 KnowItAll オプションサブスク립ションとしても利用が可能

※4 KnowItAll Food, Flavors, Fragrances GCMS Library に含まれる

*: 最新のサポートフォーマットは <https://sciencesolutions.wiley.com/compatibility/> をご確認ください。

LC-MS 対応フォーマット一覧

		Wiley Spectral Database					
Supported Vendor / Software	Wiley Registry / NIST 2023 GCのみ	NIST 2023 GCのみ	LC-MSn Drugs, Poisons & Their Metabolites	LC-HR-MS/MS Drugs, Poisons & Their Metabolites	Wiley Registry Tandem MS		
Agilent ChemStation MassHunter OpenLab PCD	✓ ✓	✓ ✓	✓ ✓	✓ ✓	✓ ✓	✓ ✓	✓ ✓
NIST MS Search	✓	✓	✓	✓	✓	✓	✓
PerkinElmer TurboMass/ SimplicityChrom	GCのみ	GCのみ					
Shimadzu GCMSolution LabSolutions	GCのみ	GCのみ		✓		✓	
Thermo Xcalibur TraceFinder Chromeleon Mass Frontier ToxFinder ToxID	GCのみ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓	✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓
Waters MassLynx UNIFI	GCのみ	GCのみ		✓		✓	✓
Bruker DataAnalysis 5.3 MS Workstation MetaboScape ToxTyper 2.0	✓	✓					
Chromatec Analytic	✓	✓					
Leco ChromaTOF	✓	✓					
JEOL msFineAnalysis	✓	✓					
Scion MS Workstation	✓	✓					
Wiley KnowItAll		KnowItAll MSサブスク립ションに含まれる (EIのみ)					
Proteome Scaffold Elements							
SCIEX OS/ LibraryView/ MasterView/Cliquid							SCIEXからのみ提供

✓ = compatible with the NIST software

* : 最新のサポートフォーマットは <https://sciencesolutions.wiley.com/compatibility/> をご確認ください。



ワイリー・パブリッシング・ジャパン株式会社

Wiley Science Solutions 製品担当

〒160-0023

東京都新宿区西新宿 8-4-2 野村不動産西新宿ビル 8 階

Tel : 03-4520-9017 FAX : 03-4520-9059

E-mail: sciencesolutions.jp@wiley.com

* 2026 年 6 月時点 (予告なく変更される場合があります)