

2019/10/24

“NMR データ解析ソフトウェア workshop”のご案内

首都大学東京大学院理学研究科

池谷 鉄兵 伊藤 隆

NMR を用いた研究は、FID データの取得、各種信号処理(フーリエ変換等)、信号帰属等のデータ解析の各ステップにおいて、コンピューターソフトウェアに依存する度合いが高いため、これをうまく使いこなすことで、データの質の向上や研究の進展速度の向上が見込まれます。そこで、今回、CCPN, Bruker 社, JEOL RESONANCE 社で開発されている各種測定・解析ソフトウェアについて、講師をお招きし、改めてこれらソフトウェアについて勉強する機会を設けました。

CCPN (Collaborative Computing Project for NMR, <http://www.ccpn.ac.uk/>)は、生体分子やメタボロミクスなどの NMR 研究に携わる研究者のための共通の計算科学的基盤を確立するために活動しているプロジェクトです。CCPN は解析ソフトウェアも提供しており、CCPN Analysis は現在でも開発が続いている数少ない NMR 解析ソフトウェアの一つとして多くの研究者に愛用されています。今回は、Analysis の新バージョン(V3)の正式リリースを記念して、CCPN の Chair である、英国レスター大学の Geerten W. Vuister 教授をお迎えし、CCPN Analysis Assign の概説と、実際の NMR データを用いたデモンストレーション/チュートリアルをしていただけることになりました。

また、JEOL RESONANCE 社, Bruker 社から、それぞれ、濱津順平博士と佐藤一博士をお招きして、両社が開発されている NMR 測定・解析ソフトウェアについて改めて勉強する機会を設けさせていただきました。お二人には、普段 JEOL Delta や Bruker TopSpin を利用されている方で、より発展的な測定・解析を学びたい研究者を対象にしたご講演をお願いしております。

ワークショップの最後には、ソフトウェア開発サイドとユーザーサイドの意見交換、および Delta や TopSpin のファイルフォーマットから CCPN への移行の仕方等を含めた総合討論の時間も設けております。ご講演者には英語での講演をお願いしておりますが、質疑応答・討論などは日本語で自由に議論できる形にしたいと思っております。

お忙しい時期ではあると思いますが、グループ内の各位にも本シンポジウムをお知らせ頂き、ご出席頂ければと考えております。

記

期日:2019年11月11日(月), 13:00~

場所:首都大学東京秋葉原サテライトキャンパス(秋葉原ダイビル 12F)

秋葉原サテライトキャンパスまでのアクセスは下記の URL をご覧ください。

http://www.tmu.ac.jp/university/campus_guide/access.html#mapakihabara

参加費:無料

参加人数:最大40名程度

参加人数を把握したいため、参加を希望される方は、tikeya@tmu.ac.jpまでご一報ください。

プログラム

- 13:00 - 13:05 Opening remarks
- 13:05 - 13:45 Introduction of CCPN version 3.0
Prof. Geerten W. Vuister
- 13:45 - 14:45 Practical course of CCPN version 3.0
(demonstration of Analysis with users's laptop PC)
Prof. Geerten W. Vuister
- 14:45 - 15:00 Coffee break
- 15:00 - 16:00 Multi-dimensional NMR by JEOL Delta NMR Software (仮)
Dr. Junpei Hamatsu
- 16:00 - 17:00 ブルカー社のソフトウェアの紹介
Dr. Hajime Sato
- 17:00 - 総合討論

講演内容

株式会社 JEOL RESONANCE Dr. Junpei Hamatsu

本ワークショップでは、弊社 NMR 装置の標準ソフトウェア “Delta NMR Software”を用いた、NMR データ測定-処理-解析の操作フローについて紹介する。具体的には、多次元 NMR 測定を中心に、測定パラメーターの設定方法から、パルスプログラムをはじめとした測定ファイルのプログラミングや、非線形サンプリングデータの測定・処理法など、応用的な使い方を交えて解説する。

ブルカージャパン株式会社 Dr. Hajime Sato

ブルカー社の NMR 分光計はソフトウェア TopSpin で制御いたします。また、サンプルチェンジャーを用いた自動測定はソフトウェア IconNMR がインターフェースとなります。これらのソフトウェアはブルカーの装置をお使いいただいているユーザー様には好評をいただいております。本ワークショップでは、分光計のメンテナンス、低分子の解析、定量、品質管理、または、蛋白質と低分子の相互作用などに関連するソフトウェアについて紹介いたします。

それでは首都大学東京秋葉原サテライトキャンパスでお待ちしています。