

結晶構造データベース活用と X線構造解析実習

- 結晶構造データの理解と解析手法を体験的に学ぶ -

X線結晶構造解析は、構造の可視化のみならず、他に類を見ないほど充実したデータベースや関連ソフトウェアの存在も大きな特徴です。本実習セミナーでは、低分子の結晶構造データベースであるCSDの活用方法と、X線構造解析ソフトウェアを用いた基本的な解析手法を実習形式で学びます。構造データの検索・可視化から、回折データを用いた構造決定の基礎までを体験的に学ぶことを目的とし、産業界における活用の第一歩を支援します。これまで結晶構造解析に接点がなかった方の参加も歓迎します。

※本実習では、ご参加者各位のPC（OS：Win10/11推奨）を使用します。

【開催日時】

2025年

11月7日(金)

9:50～16:30
(9:20より受付開始)

【開催場所】

地方独立行政法人大阪産業技術研究所
森之宮センター 3階 大講堂

【受講料】 無料

【定員】 40名

【申込方法】

下記URL（ホームページ）または
二次元バーコードよりお申し込みください。

講演
タイトル

- ① ケンブリッジ結晶構造データベース（CSD）・
蛋白質構造データバンク（PDB）について
- ② ケンブリッジ結晶構造データベース（CSD）と
無機結晶構造データベース（ICSD）活用実習
- ③ ソフトウェアによるX線構造解析実習



<https://orist.jp/>

大阪技術研

検索

プログラム

1.開会挨拶

9:50~10:00

大阪産業技術研究所 電子材料研究部 小林靖之

2.ケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)・

蛋白質構造データバンク(PDB)について 10:00~10:30

大阪大学蛋白質研究所所長 栗栖 源嗣 教授

低分子化合物の結晶構造情報を収録した「ケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)」と、蛋白質などの生体高分子を対象とした「蛋白質構造データバンク(PDB)」について、データベースが整備されてきた背景や、それぞれの役割、社会との関わりについて解説します。

3.ケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)と

無機結晶構造データベース(ICSD)活用実習 10:30~12:30

化学情報協会 藤井 久美子 氏

本実習では、ケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)と無機結晶構造データベース(ICSD)の収録内容や付属ソフトについてご説明した後、結晶構造を検索・可視化・解析するソフト等の基本的な操作方法を実際に体験していただきます。

4.ソフトウェアによるX線構造解析実習

13:30~16:30

株式会社リガク 清田 祥生 氏

本実習では、専用ソフトウェアを用いたX線結晶構造解析の基本的な操作を体験します。結晶一粒の測定データから、結晶を構成する原子や分子の並び方、および分子構造を求める流れを体験し、構造解析の基礎的な考え方と手法を学びます。

【お問い合わせ】

地方独立行政法人大阪産業技術研究所 企画部（辻谷、尾崎）

〒536-8553 大阪市城東区森之宮1丁目6番50号

TEL : 06-6963-8331、E-mail : event@orist.jp