



基礎から学ぶ最新NMR解析法

第13回ワークショップ

見える化NMR

NMR実験に活かすMDシミュレーション

2026年8月18日(火)~19日(水)

入門ワークショップ

ハイブリッド開催

大阪大学蛋白質研究所 & Zoom オンライン

生体系NMR法の最前線



ロゴが
新しく
なりました!



本ワークショップでは、NMR スペクトロスコピーと分子動力学 (MD) シミュレーションの融合をテーマに掲げました。NMR による実験データと MD シミュレーションによる理論的知見を相互に活用することで、タンパク質の動的構造解析をより深化させることを目的としています。今回は基礎講義およびHands-on実習をメインとし、NMRユーザーがシミュレーション手法を実体験する機会を設けるとともに、応用事例を通じて最新の解析手法を学ぶ場になりたいと考えております。



原子一つ一つに数式を設定して
膨大な計算をさせるには
スパコンが必要…!?

クラウド
仮想マシンの
出番だね!



8月18日

13:00 - 開会あいさつ
栗栖 源嗣 (大阪大学)

13:05 - 趣旨説明
宮ノ入 洋平 (大阪大学)

13:15 - 基礎講義①
14:15

実験では見えない
ダイナミクスを可視化する:
MDシミュレーション基礎
李 秀栄 先生 (医薬基盤健康栄研)

休憩

14:35 - Hands-on実習
16:35

Google Colabで
OpenMMを動かそう
李 秀栄 先生 (医薬基盤健康栄研)

休憩

16:55 - 応用例講演①
17:35

ウェットとドライの融合に
基づくscFvの物性改善
小橋川 敬博 先生 (熊本大学)

18:00 - 懇親会

NMRとMDそれぞれの
得意分野を活かせば
お互いの不得意を
補い合えるね!



8月19日

9:00 - 実習結果解釈と振り返り
11:00

李 秀栄 先生 (医薬基盤健康栄研)

基礎講義②

MDシミュレーションを
実践で活用する:
GENESISの紹介とデモ
信夫 愛 先生 (大阪大学)

11:10 - 応用例講演②
11:50

MD計算とNMRで捉える
抗体医薬Fab領域の
動的構造の変化
林 成一郎 先生 (分子研)

11:50 - 開会あいさつ
12:00

齋尾 智英 (徳島大学)

李先生



MDは
ハードルが高い?
まずは実際に
体験してみよう!

いつか富岳に
計算させたい…!

信夫先生



実験で得られない
分子の情報も
MDで見えてくる!

小橋川
先生



林先生



タンパク質が原子レベルで
動いていることは
NMRで調べられるんだけど、
どんな風に動いているかまでは
分からないんだよね…。

PCを持って
セミナー室に
集合~!!!

オープンソース
ソフトウェアも
充実してきた…!

Molecular Dynamics simulation (MD)

分子動力学計算 をやるぞ!

シミュレーション結果の
解釈が不安…
本当にこれで合ってる?



じゃあNMRで
ちゃんと確かめてみよう!

MDなら

映像のコマ送りみたいに
分子の動きを再現して、
タンパク質のフォールディングや
タンパク質と薬が結合する
様子を見られるよ!

主催: 大阪大学 蛋白質研究所
共催: 次世代 NMR ワーキンググループ
日本生物物理学会

世話人: 久米田 博之, 齋尾 智英, 竹内 恒
田巻 初, 日比野 絵美, 宮ノ入 洋平
八木 宏昌



お申し込みはこちら
<https://nextnmr.jp>

