

蛋白研セミナー

基礎から学ぶ最新 NMR 解析法 第 13 回ワークショップ

ー 見える化 NMR: NMR 実験に活かす MD シミュレーション 入門ワークショップ ー 開催のお知らせ

2026/08/04

世話人 久米田博之(北海道大)、齋尾智英(徳島大)、竹内恒(東京大)、田巻初(JEOL)、日比野絵美(名古屋大)、宮ノ入洋平(大阪大)、八木宏昌(旭化成ファーマ)

本ワークショップでは、NMR で得られる立体構造や分子動態の情報を、分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) シミュレーションによって検証・可視化し、分子の動きに対する理解を深めることを目指します。NMR と MD を相補的に活用することで、実験で観測された構造揺らぎや構造変化が、どのような分子運動に由来するのかを具体的に捉えることが期待できます。

MD シミュレーションの基礎講義に加え、Google Colab 上で OpenMM を動かすハンズオン実習を行います。計算のセットアップから実行、結果の可視化と解釈までの一連の流れを体験するとともに、より高度な計算が可能な“GENESIS”の紹介も行います。また、NMR と MD を組み合わせたタンパク質研究の応用事例についても紹介します。MD をこれから始めたい方、NMR で得られた構造・動態情報をより深く理解したい方、実験結果を分子の「動き」として見える化したい方を対象とした実践的な講習会です。

開催日時: 2026 年 8 月 18 日 (火) - 19 日 (水)

開催場所: 大阪大学蛋白質研究所講堂 + zoom オンライン

事前登録・詳細情報: <https://nextnmr.jp>