

2006/05/18

## RRR workshop 2006のご案内

|                 |                 |
|-----------------|-----------------|
| 首都大学東京大学院理工学研究科 | 伊藤 隆            |
| 京都大学大学院工学研究科    | 白川 昌宏           |
| ブルカー・バイオスピン     | Markus Waelchli |

今回で 10 回目となる「RRR workshop」を、7 月 14～16 日に京都大学芝蘭会館別館 (<http://www.shirankai.or.jp/>)において、下記の要領で開催いたします。本ワークショップは若手 NMR 研究者が最先端の理論と方法を学び今後の発展について討論する場を目指しています。

今年のテーマとして、生体高分子をターゲットとした「溶液 NMR の測定法」および「データ解析と高次構造計算」に注目したいと考えております。海外からは次の 3 名の講師をお招きしました。

一人目は Cambridge 大学の Daniel Nietlispach 博士で、溶液 NMR の測定法の基本的な事項から、高分子量蛋白質や膜蛋白質などの「困難な」試料に対する溶液 NMR のアプローチまでを概説していただきます。

二人目は同じく Cambridge 大学の Wayne Boucher 博士です。Boucher 博士は現在英国の CCPN(Collaborative Computing Project for NMR)プロジェクトでソフトウェアの開発をされています。今回は CCPN のデータモデルおよびソフトウェアについて解説していただくとともに、最大エントロピー法をはじめとする様々な NMR データ処理についても講義をしていただく予定です。

三人目は Pasteur 研究所の Michael Nilges 博士の研究室で仕事をされている Wolfgang Rieping 博士です。Rieping 博士には ARIA プログラムを用いた高次構造計算について、また最近研究されている新しい構造計算の手法について講義をお願いしています。

国内からは理研 GSC の Kimmo Paakkonen 博士、京都大学の朽尾豪人博士をお招きし、Paakkonen 博士には高次構造計算のプロセスについての概説と CYANA プログラムについて、朽尾博士には In-Cell NMR についてお話いただきます。

今回のワークショップでは新たな試みとして、参加者の中から希望者を募って短い発表(英語)をしていただき、その後講師を交えて議論をするという形式で進行させていただきます。皆様奮って議論にご参加ください。また、NMR のハードウェアに関するセッションも設けてあります。

皆様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セミナーをお知らせ頂き、ご出席頂ければと考えております。

それでは京都大学芝蘭会館別館でお待ちしています。

## RRR workshop 2006

期日: 2006年7月14日(金)~16日(日)  
場所: 京都大学芝蘭会館別館(<http://www.shirankai.or.jp/>)  
時間: 7月14日: 13:00~19:20  
7月15日: 9:00~18:10(終了後懇親会)  
7月16日: 9:00~13:20

参加は原則として3日間参加できる方に限りたいと思います。

参加費: 無料。ただし懇親会費を別途徴収する予定です。

### 参加申し込み:

6月23日(金)までに、首都大学東京の伊藤 隆(ito-yutaka@center.tmu.ac.jp)あてに、電子メールにてお申し込みください。

電子メールの件名に「RRRワークショップ参加申し込み」と御記入いただき、内容に、①お名前、②所属、③Eメールアドレス、④電話番号、⑤短い発表希望の有無をご記入ください。

### 御注意:

会期中に京都では祇園祭りが開かれております。なお宵山は7月14~16日、祭りのハイライトである山鉾巡行は7月17日午前9時からです。

込み合うことが予想されますので、オーガナイザー側である程度の数の部屋をあらかじめ押さえる予定です。宿泊の手配を御希望の方はなるべく早く御連絡ください。なお、押さえられる部屋の数には限りがあると思いますので、御希望に添えない場合にはどうか御容赦ください。

また、ご自身で宿泊を手配される場合も、お早めに手配されることをお勧めいたします。

\* なお、今年のワークショップは特定領域研究「膜インターフェイス」(代表 阪大・蛋白研 阿久津秀雄先生)の援助を受けて開催されます。

## ===== プログラム =====

| Day 1       | 14th July                               |                    |
|-------------|---|--------------------|
| 13:00-13:10 | Opening remarks                         | Masahiro Shirakawa |
| 13:10-14:40 | Solution NMR techniques                 | Daniel Nietlispach |
| 14:40-15:00 | Break                                   |                    |
| 15:00-16:00 | NMR techniques for difficult samples    | Daniel Nietlispach |
| 16:00-16:30 | Short presentation(s) from the audience |                    |
| 16:30-17:00 | Discussions                             |                    |
| 17:00-17:20 | Break                                   |                    |
| 17:20-18:50 | NMR hardware                            | Markus Waelchli    |
| 18:50-19:20 | Discussions                             |                    |

|             |   |                  |
|-------------|---|------------------|
| Day 2       | 15th July                               |                  |
| 09:00-10:00 | CCPN data model                         | Wayne Boucher    |
| 10:00-11:00 | MEM and other processing methods        | Wayne Boucher    |
| 11:00-11:20 | break                                   |                  |
| 11:20-11:50 | Short presentation(s) from the audience |                  |
| 11:50-12:20 | Discussions                             |                  |
| 12:20-13:50 | Lunch                                   |                  |
| 13:50-14:50 | CCPN "Analysis" program                 | Wayne Boucher    |
| 14:50-15:20 | Short presentation(s) from the audience |                  |
| 15:20-15:50 | Discussions                             |                  |
| 15:50-16:10 | Break                                   |                  |
| 16:10-17:10 | In-Cell NMR                             | Hidehito Tochio  |
| 17:10-18:10 | Structure calculations from NMR data    | Kimmo Paakkonen  |
| 19:00-      | Party                                   |                  |
| Day 3       | 16th July                               |                  |
| 09:00-10:00 | CYANA                                   | Kimmo Paakkonen  |
| 10:00-11:00 | ARIA                                    | Wolfgang Rieping |
| 11:00-11:20 | Break                                   |                  |
| 11:20-12:20 | New methods                             | Wolfgang Rieping |
| 12:20-12:50 | Short presentation(s) from the audience |                  |
| 12:50-13:20 | Discussions                             |                  |