

第51回 NMR 討論会

The 51st Annual Meeting of The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan

会 期： 2012年11月8日(木)～10日(土)
November 8(Thu)-10(Sat), 2012
会 場： ウィンクあいち
WINC HALL
〒450-0002 愛知県名古屋市中村区名駅4-4-38

第1日目 11月8日(木) / Day 1 (Nov. 8, Thu)

9:25 ~ 9:30

開会の挨拶 朝倉 哲郎 (日本核磁気共鳴学会会長)

9:30 ~ 10:30

座長 児嶋 長次郎

L1 脂質膜中におけるアンフォテリシンB-エルゴステロール分子間相互作用の固体NMR解析
Bimolecular Interaction Analysis between Amphotericin B and Ergosterol
in Lipid Membrane as Viewed by Solid-State NMR

○梅川 雄一, 中川 泰男, 土川 博史, 松森 信明, 村田 道雄 (大阪大学大学院 理学研究科)

L2 絹の多様な¹³Cラベル化と固体NMRによるβシート構造の解析
Structural analysis of silks with β-sheet structure by combination of
several ¹³C labeling and solid-state NMR

○奥下 慶子¹, 小川 達也¹, 鈴木 悠¹, 宮澤 健太¹, 中澤 靖元¹, 朝倉 哲郎^{1,2} (¹東京農工大学大学院 工学府, ²分子科学研究所)

L3 ベイズ法を利用した新規構造計算手法の開発
Development of the Bayesian-based structure determination

○池谷 鉄兵¹, 嶋崎 真那人¹, 三島 正規¹, 伊藤 隆¹, Peter Güntert^{1,2,3} (¹首都大学東京大学院 理工学研究科, ²フランクフルトゲーテ大学 生物物理研究科, ³フランクフルトゲーテ大学 先端研究所)

10:30 ~ 10:40 休憩/Break

10:40 ~ 11:20

Chairperson: Daisuke Kohda

L4 A solid-state NMR study of banana liquid crystals
○Kazuhiko Yamada¹, Sungmin Kang¹, Eun Woo Lee¹, E-Joon Choi², Kenzo Deguchi³, Tadashi Shimizu³, Junji Watanabe¹ (¹Tokyo Institute of Technology, ²Kumoh National University of Technology, ³National Institute for Materials Science)

L5 Induction of Residual Dipolar Coupling by Aggregates of Magnetically
Aligning Self-Assembled Complexes

○Ryosuke Takeuchi¹, Sota Sato¹, Maho Yagi^{3,4}, Yoshiki Yamaguchi², Koichi Kato^{3,4,5}, Makoto Fujita^{1,5} (¹Department of Engineering, The University of Tokyo, ²RIKEN, ³Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Nagoya City University, ⁴Okazaki Institute for Integrative Bioscience, ⁵CREST)

11:20 ~ 12:00

Chairperson: Yutaka Ito

- L6 Pressure-induced chemical shifts as probes for conformational fluctuations in proteins
○Ryo Kitahara¹, Kazumi Hata², Hua Li³, Michael P Williamson⁴, Kazuyuki Akasaka⁵ (¹ College of Pharmaceutical Sciences, Ritsumeikan University, ² R-GIRO, Ritsumeikan University, ³ Shanghai Institute of Biochemistry and Cell Biology, Institute for Biological Sciences, ⁴ Department of Molecular Biology and Biotechnology, The University of Sheffield, ⁵ High Pressure Protein Research Center, Institute of Advanced Technology, Kinki University)
- L7 Transient Structure of the Kinetic Intermediate of Apomyoglobin Monitored by Quench-Flow HD Exchange NMR
○Chiaki Nishimura^{1,2}, Peter E. Wright¹ (¹ Department of Molecular Biology, The Scripps Research Institute, ² Faculty of Pharmaceutical Sciences, Teikyo-Heisei University)

12:05 ~ 12:35 日本核磁気共鳴学会総会 / Meeting of the NMR Society of Japan

12:35 ~ 13:50 昼食 / Lunch
ランチョンセミナー / Luncheon Seminar

13:50 ~ 15:20 ポスターセッション (偶数番号、若手ポスター賞審査)
Poster Session (even numbers)
including poster presentations for Young Scientists Poster Awards

15:20 ~ 15:30 移動・休憩 / Break

Parallel Session 1

15:30 ~ 18:30 "New Frontiers of NMR in Asia"

Chairpersons: Hideo Akutsu and Koichi Kato

15:30 ~ 15:35 Introduction

15:35 ~ 17:05

IL1 *Invited Lecture 1*
Recognition and regulation of small ubiquitin-like modifier (SUMO)
○Tai-huang Huang (Institute of Biomedical Sciences Academia Sinica)

IL2 *Invited Lecture 2*
Method Development and Application of Magnetic Resonances for Membrane Protein Structure and Function Studies
Chaowei Shi¹, Kaiqi Wu¹, Pan Shi², Juan Li¹, Dong Li¹, Fangming Wu², ○ Changlin Tian^{1,2}
(¹ School of Life Sciences, University of Science and Technology of China, ² High Magnetic Field Laboratory, Chinese Academy of Sciences)

IL3 *Invited Lecture 3*
To walk or not to walk, and how should they walk:
myosin's "clients" share some decision making power
○Mingji Zhang (Division of Life Science, Hong Kong University of Science and Technology)

17:05 ~ 17:20 Break / 休憩

17:20 ~ 18:20

IL4 *Invited Lecture 4*

Are the Dynamics of Acyl Carrier Protein Domain in FAS/PKS Critical to its Function?
Jackwee Lim¹, Huihua Sun², Jing-Song Fan¹, Zhao-Xun Liang², ○Daiwen Yang¹ (¹ Department of Biological Sciences, National University of Singapore, ² School of Biological Sciences, Nanyang Technological University)

IL5 *Invited Lecture 5*

NMR-based rational drug design: Applications to GPCR-targeted drugs
○Weontae Lee¹, Jihye Yun¹, Daesuk Oh¹, Sung-Kil Lim² (¹ Department of Biochemistry and Structural Biochemistry & Molecular Biophysics Laboratory, Yonsei University, ² Department of Internal Medicine, College of Medicine, Yonsei University)

18:20 ~ 18:30 **Discussion**

Parallel Session 2

15:30 ~ 18:30 「材料分析・評価・品質管理におけるNMR」

座長 吉水 広明, 浅川 直紀

15:30 ~ 15:35 趣旨説明

15:35 ~ 16:25

IL6 *Invited Lecture 6*

合成高分子の一次構造解析にむけた溶液NMRのアプローチ：
スペクトルの多変量解析とDOSY

Multivariate Analysis and DOSY — Solution NMR Approaches to the Molecular Characterization of Synthetic Polymers

○右手 浩一 (徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部)

16:25 ~ 16:35 **休憩/Break**

16:35 ~ 17:25

IL7 *Invited Lecture 7*

NMRの分析手法としての汎用性について

NMR as a versatile analytical tool for industrial issues from research and development activities to quality control

○山口 秀幸 (味の素株式会社イノベーション研究所 フロンティア研究所食品官能特性研究グループ)

IL8 *Invited Lecture 8*

無機ガラス材料の構造解析入門編

An introduction of structural analysis for glass

○関 庚薫 (旭硝子(株)中央研究所)

17:25 ~ 17:35 **休憩/Break**

17:35 ~ 18:25

IL9 *Invited Lecture 9*

リチウムイオン二次電池材料のNMR分析

NMR analysis of Li-ion battery materials

○上口 憲陽 (株式会社日産アーク)

IL10 *Invited Lecture 10*
NMRと材料開発
NMR applications for the material developments
○橋本 康博 (旭化成 (株)・新事業企画開発室)

18:25 ~ 18:30 総合討論

18:40 ~ 評議員会 (会議室 906)

第2日目 11月9日(金) / Day 2 (Nov. 9, Fri)

9:10 ~ 9:50

Chairperson: Masatsune Kainosho

- L8 Interaction of RNA Aptamer with Prion Protein and Monitoring of Biodegradation of Wood Biomass
Tsukasa Mashima¹, Hiroshi Nishimura^{2,5}, Hideyasu Okamura¹, Fumiko Nishikawa³, Yuji O. Kamatari⁴, Takashi Nagata¹, Satoshi Nishikawa³, Kazuo Kuwata⁴, Takashi Watanabe^{2,5}, ○Masato Katahira^{1,5} (¹Institute of Advanced Energy, Kyoto University, ²RISH, Kyoto University, ³AIST, ⁴Gifu University, ⁵CREST)
- L9 Functional modulation of protein through the change in its structure dynamics
○Shin-ichi Tate (Department of Mathematical and Life Sciences, Hiroshima University)

9:50 ~ 10:30

Chairperson: Ichio Shimada

- IL11 *Invited Lecture 11*
Dynamics on the surface of amyloid β protofibrils in solution:
Dark-state exchange saturation transfer NMR
○Nicolas L. Fawzi¹, Jinfa Ying¹, Rodolfo Ghirlando², Dennis A. Torchia³, G. Marius Clore¹
(¹Laboratories of Chemical Physics, ²Molecular Biology, National Institute of Diabetes and Digestive and Kidney Diseases, ³National Institute of Dental and Craniofacial Research, National Institutes of Health)

10:30 ~ 10:40 Break/休憩

10:40 ~ 11:20

Chairperson: Fuyuhiko Inagaki

- L10 Manganese-enhanced MRI using intermediate-affinity manganese chelates
○Yoshiteru Seo¹, Hironobu Morita², Masataka Murakami³ (¹Dept of Regulatory Physiology, Dokkyo Medical University School of Medicine, ²Dept of Physiology, Gifu University Graduate School of Medicine, ³National Institute for Physiological Sciences)
- L11 Electronic Structure of Heme Sandwiched between All-parallel G-quadruplex DNAs
○Yasuhiko Yamamoto¹, Hulin Tai¹, Kaori Saito¹, Hikaru Hemmi², Nagao Kobayashi³
(¹Department of Chemistry, University of Tsukuba, ²National Food Research Institute, National Agriculture and Food Research Organization, ³Department of Chemistry, Graduate School of Science, Tohoku University)

11:20 ~ 12:00

Chairperson: Michio Murata

- IL12 *Invited Lecture 12*
New Developments in the ADEQUATE NMR Experiments
○R. Thomas Williamson¹, Gary E. Martin², Alexei Buevich³, Misha Reibarkh¹, Wolfgang Bermel⁴
(¹Merck & Co. Inc. Discovery and Preclinical Sciences, Process and Analytical Chemistry-Structure Elucidation, ²Merck & Co. Inc. Discovery and Preclinical Sciences, Process and Analytical Chemistry-Structure Elucidation, ³Merck & Co. Inc. Discovery and Preclinical Sciences, Process and Analytical Chemistry-Structure Elucidation, ⁴Bruker BioSpin GmbH)

12:00 ~ 13:30 Lunch/昼食

新評議員会・新理事会 (会議室 906)

13:30 ~ 14:10

Chairperson: Kiyonori Takegoshi

- L12 ^1H - ^{14}N overtone HMQC above 110 kHz MAS
○Yusuke Nishiyama, Michal Malon, Takahiro Nemoto, Yuki Endo (JEOL RESONANCE Inc.)
- L13 Breakdown of a common notion for ^{29}Si NMR of aluminosilicates:
Information from J-resolved and CPMG measurements
○Xianyu Xue, Masami Kanzaki (Institute for Study of the Earth's Interior, Okayama University)

14:10 ~ 14:50

Chairperson: Motohiro Mizuno

- IL13 *Invited Lecture 13*
Following Function in Real Time: New NMR and MRI Methods for
Studying Structure and Dynamics in Batteries, Fuel Cells and Supercapacitors
○Clare P. Grey (¹Department of Chemistry, University of Cambridge, ² Department of Chemistry, Stony Brook University)

14:50 ~ 15:00 **Break/休憩**

15:00 ~ 15:40

Chairperson: Makoto Demura

- L14 Photo reaction cycle and photo-activated structural changes of photoreceptor membrane proteins as revealed by *in situ* photoirradiated solid-state NMR
○Akira Naito¹, Yuya Tomonaga¹, Tetsuro Hidaka¹, Ryota Miyasa¹, Izuru Kawamura¹, Yuki Sudo², Takashi Okitsu³, Akimori Wada³, Naoki Kamo⁴ (¹ Graduate School of Engineering, Yokohama National University, ² Graduate School of Science, Nagoya University, ³ Department of Organic Chemistry for Life Science, Kobe Pharmaceutical University, ⁴ College of Pharmaceutical Science, Matsuyama University)
- L15 Automated Signal Assignment and Secondary Structural Analysis of Non-Crystalline Proteins by Fragment-Based Solid-State NMR Spectral Reconstruction
○Keisuke Ikeda^{1,2}, Ayako Egawa¹, Kokoro Hayashi³, Chojiro Kojima¹, Toshimichi Fujiwara¹ (¹ Institute for Protein Research, Osaka University, ² Graduate School of Pharmaceutical Sciences, University of Toyama, ³ Graduate School of Biological Sciences, Nara Institute of Science and Technology)

15:40 ~ 16:20

Chairperson: Akira Naito

- IL14 *Invited Lecture 14*
Interleaved CW irradiation and rf pulses for efficient re- and decoupling in solid-state NMR
○Niels C. Nielsen (Center for Insoluble Protein Structures (inSPIN), Interdisciplinary Nanoscience Center (iNANO) and Department of Chemistry, Aarhus University)

16:20 ~ 16:30 **Break/休憩**

16:30 ~ 17:10

Chairperson: Yoshifumi Nishimura

HL1 *Honorary Lecture 1*
Protein NMR before the dawn
○Keiichi Kawano (Grad. Sch. Life Sci., Hokkaido University)

17:10 ~ 17:50

Chairperson: Tetsuo Asakura

HL2 *Honorary Lecture 2*
A short essay on my NMR studies
○Taro Eguchi (Osaka University)

17:50 ~ 18:30

Chairperson: Mitsuhiko Ikura

IL15 *Invited Lecture 15*
Singlet NMR
○Malcolm H. Levitt (Southampton University)

18:45 ~ **Banquet (Hotel Castle Plaza)/懇親会 (キャッスルプラザ)**

第3日目 11月10日(土) / Day 3 (Nov. 10, Sat)

9:10 ~ 9:50

座長 河合 剛太

- L16 SAIL – NMR法によるジスルフィド結合の立体配座決定と動態解析
SAIL-NMR studies on the disulfide bond conformation and dynamics in proteins
○武田 光広¹, 寺内 勉^{2,3}, 甲斐荘 正恒^{1,2,4}, (1名古屋大学大学院 理学研究科, 2首都大学東京 戦略研究センター, 3SAILテクノロジーズ, 4大阪大学 蛋白質研究所)
- L17 高分子量機能性RNAの局所構造・状態解析のため部位特異的標識法
Site-specific stable-isotope-labeling techniques of RNA molecules for structural and mechanistic studies with NMR spectroscopy
○田中 好幸¹, 芦原 悠太¹, 春田 佳一郎¹, 河原 郁美^{1,2}, 児嶋 長次郎², (1東北大学大学院 薬学研究科, 2大阪大学 蛋白質研究所)

9:50 ~ 10:30

座長 大木 進野

- L18 βラクトグロブリンの折り畳みストラテジー
Folding Strategy of bovine β-Lactoglobulin
○櫻井 一正¹, 北山 寛貴¹, 八木 正典², 池上 貴久¹, 西村 千秋³, 後藤 祐児¹, (1大阪大学 蛋白質研究所, 2大阪大学 微生物病研究所, 3帝京平成大学 薬学部)
- L19 Structure and dynamics of yeast calmodulin
○小椋 賢治¹, 岡村 英保², 久米田 博之¹, 矢澤 道生³, 稲垣 冬彦¹, (1北海道大学先端生命科学研究院, 2京都大学エネルギー理工学研究所, 3北海道大学大学院理学研究科)

10:30 ~ 10:40 休憩/Break

10:40 ~ 11:20

座長 山本 泰彦

- L20 準静的な内部/外部磁場勾配下でのNMR：
固体高分子の輸送現象と磁気共鳴イメージング
A utilization of internal/external quasi-static magnetic field gradients:
transport phenomenon and magnetic resonance imaging of solid polymers
○浅川 直紀, 小畑 命輝 (群馬大学大学院工学研究科応用化学・生物化学専攻)
- L21 ナノダイヤモンドを用いた光検出磁気共鳴顕微鏡装置の開発と生物試料への応用
Development of a microscope optically detecting magnetic resonance in nanodiamond and application to observation of biological samples
○森 重之¹, 吉成 洋祐², 五十嵐 龍治¹, 外間 進悟¹, 横田 浩章², 栃尾 豪人¹, 白川 昌宏¹, 原田 慶恵^{2,3}, 池田 和寛⁴, 角谷 均⁴ (1京都大学大学院工学研究科, 2京都大学物質-細胞統合システム拠点, 3京都大学大学院生命科学研究院, 4住友電気工業株式会社 エレクトロニクス・材料研究所)

11:20 ~ 12:00

座長 林 繁信

- L22 固体⁴³Ca NMRによるガラス中のカルシウムの構造的役割の特定
Probing the structural role of calcium in alkaline and alkaline-earth aluminosilicate glass by solid-state ⁴³Ca NMR
○金橋 康二 (新日鐵住金(株) 先端技術研究所)

L23 高磁場光ポンピングによるアルカリ金属イオンの核スピン偏極
High-field optical pumping for nuclear spin polarization of alkali-metal ions
○石川 潔 (兵庫県立大学大学院 物質理学研究科)

12:00 ~ 13:15 昼食/Lunch

13:15 ~ 14:45 ポスターセッション (奇数番号)
Poster Sessions (odd numbers)

14:45 ~ 14:55 移動・休憩/Break

14:55 ~ 16:35 若手ポスター賞受賞口演
Short talks by Young Scientists Poster Awards Winners

座長 藤原 敏道, 鈴木 榮一郎

16:35 ~ 16:45 休憩/Break

16:45 ~ 17:45

座長 平冲 敏文

L24 固体NMRによるマジックサイズCdSeナノ粒子の表面構造解析
Solid-State NMR Study of Surface Structure on Magic-Sized CdSe Nanoparticles
○野田 泰斗^{1,2}, 水野 敬³, 武田 和行¹, 竹腰 清乃理¹, 粕谷 厚生⁴, (¹京都大学大学院理学研究科, ²JST・先端, ³(株)JEOL RESONANCE, ⁴東北大学学際センター)

L25 常磁性により複雑化したMAS線形における選択励起
ーリチウムイオン電池正極材への応用ー
Selective excitation of a MAS sideband spectrum spreading widely by
paramagnetic interaction: application to cathode materials of Li-ion battery
○村上 美和¹, 高澤 信明², 汐月 大志², 寺島 純平², 荒井 創¹, 内本 喜晴³, 小久見 善八¹, (¹京都大学 産官学連携本部, ²トヨタ自動車株式会社, ³京都大学大学院 人間・環境学研究科)

L26 固体¹⁵N NMRを用いた鉄含有ポリアニリン炭素化物の構造解析
¹⁵N Solid State NMR Study of Iron-Containing Pyrolyzed Polyaniline
○黒木 重樹¹, 上口 憲陽², 木村 英昭³, 山内 一夫⁴, (¹東京工業大学大学院 理工学研究科, ²(株)日産アーク, ³ブルカー・バイオスピン (株), ⁴KAUST)

17:45 閉会の挨拶 加藤 晃一 (第51回NMR討論会世話人代表)