

第52回 NMR 討論会

The 52nd Annual Meeting of The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan

会 期： 2013年11月12日(火)～14日(木)
November 12 (Tue)–14 (Thu), 2013
会 場： 石川県立音楽堂 邦楽ホール
ISHIKAWA ONGAKUDO
〒920-0856 石川県金沢市昭和町20-1

English lecture

Poster Session

第1日目 11月12日(火) / Day 1 (Nov. 12, Tue)

9:25 ~ 9:30

開会の挨拶 朝倉 哲郎 (日本核磁気共鳴学会会長)

Opening remarks: Tetsuo Asakura (President of The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan)

9:30 ~ 10:10

座長 林 繁信

L1 多量子カウンティング法を用いたリチウム電池正極材料の研究

Application of Multi-Quantum Counting NMR for Positive Electrode Materials of Lithium Ion Battery

○村上 美和¹, 最上 祐貴², 清水 俊介², 竹腰 清乃理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, ²京都大学大学院 理学研究科, ³京都大学大学院 人間・環境学 研究科)

L2 イオン伝導性配位高分子の開発と拡散NMR・固体NMRによる伝導機構の解明

Diffusion NMR and solid-state NMR study on fast ion conducting coordination polymers

○犬飼 宗弘¹, 堀毛 悟史^{2,3}, 上坪 祐介², 梅山 大樹², 北川 進^{1,2} (¹京都大学 物質-細胞 統合システム拠点, ²京都大学大学院 工学研究科, ³JST-さきがけ)

10:10 ~ 10:50

座長 西村 勝之

L3 GPI アンカー型蛋白質模倣分子の脂質二重膜存在下での固体NMR測定

Solid-state NMR Spectra of Pseudo GPI-anchored Protein in membranes under Magic Angle Spinning

○野村 薫, 原田 英里砂, 菅瀬 謙治, 島本 啓子 (サントリー生命科学財団 生物有機科学 研究所)

L4 ¹⁵N NMRによる環状イミドリン酸イオン群の互変異性のpH依存性とプロトン伝導特性 pH dependence of Tautomerism Equilibria and Proton Conductivity of Various *Cyclo*-imidophosphate Anions by ¹⁵N NMR

○牧 秀志, 片岡 大亮, 水畑 穰 (神戸大学大学院 工学研究科)

10:50 ~ 11:00 休憩/Break

11:00 ~ 12:00

Chairperson: Hironori Kaji

- L5 A Solid-state ^{17}O NMR Study of Molecular Dynamics for Water in Organic Compounds
○Kazuhiko Yamada¹, Shinji Yamada², Nodoka Sako², Kenzo Deguchi³, Tadashi Shimizu³ and Junji Watanabe¹ (¹Tokyo Institute of Technology, ²Ochanomizu University, ³National Institute for Materials Science)
- L6 Quick measurement of ^1H solid-state NMR at very fast MAS
Yue Qi Ye¹, Michal Maloň¹, Charlotte Martineau², Francis Taulelle², ○Yusuke Nishiyama¹ (¹JEOL RESONANCE Inc., ²University of Versailles)
- L7 The Paramagnetic Effects of Iron Ion in Nitrogen-Doped Carbon ORR Active Electrochemical Catalysts
○Shigeki Kuroki¹, and Hideyuki Hara² (¹Department of Organic and Polymeric Materials, Tokyo Institute of Technology, ²Bruker Biospin Japan)

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 (ウェルカムランチ)

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 休憩/Break

15:30 ~ 16:05

座長 鈴木 榮一郎

- IL1 *Invited Lecture 1*
縮合系合成高分子の溶液 NMR 構造解析
Structural analysis of condensation polymers using NMR
○松田 裕生¹, 菅沼 こと¹, 朝倉 哲郎^{2,3} (¹帝人株式会社 構造解析研究所, ²東京農工大学 工学部, ³分子科学研究所)

16:05 ~ 16:40

座長 浅野 敦志

- IL2 *Invited Lecture 2*
鉄鋼業における固体 NMR の活用
Application of solid-state NMR to steel industry
○金橋 康二 (新日鐵住金株式会社 先端技術研究所)

16:40 ~ 16:55 休憩/Break

16:55 ~ 17:30

座長 水野 元博

II3 *Invited Lecture 3*

多孔性ソフト結晶材料の化学と応用

Chemistry and Application of Porous Soft Materials

○北川 進¹, 犬飼 宗弘¹, 堀毛 悟史^{2,3}

(¹京都大学 物質-細胞統合システム拠点, ²京都大学大学院 工学研究科, ³JST-さきがけ)

17:30 ~ 18:05

座長 大木 進野

II4 *Invited Lecture 4*

質量選別した気相イオンのNMR分光法の開発

Development of NMR Spectroscopy for Mass-selected Molecular Ions

○富宅 喜代一 (神戸大学大学院 理学研究科)

18:05 ~ 18:40

座長 池上 貴久

II5 *Invited Lecture 5*

糖鎖の機能解明を目指したNMRアプローチ

NMR approaches for elucidating the functional roles of glycans

○加藤 晃一^{1,2,3,4} (¹自然科学研究機構分子科学研究所 岡崎統合バイオサイエンスセンター, ²名古屋市立大学大学院 薬学研究科, ³お茶の水女子大学 糖鎖科学教育研究センター, ⁴株式会社 グライエンス)

18:55 ~ 日本核磁気共鳴学会 評議員会 (新評議員は出席の必要はありません)

第2日目 11月13日(水) / Day 2 (Nov. 13, Wed)

9:00 ~ 10:00

Chairperson: Hiroaki Terasawa

- L8 Development and application of the methodology to investigate wood biomass by solution NMR
Hideyasu Okamura^{1,2}, Hiroshi Nishimura^{3,2}, Yoshinori Imamura⁴, Yu Kozawa¹, Noritsugu Terashima⁴, Yasuyuki Matsushita⁴, Kazuhiko Fukushima⁴, Takashi Watanabe^{3,2}, and ○Masato Katahira^{1,4} (¹Institute of Advanced Energy, Kyoto University, ²CREST, JST, ³Research Institute for Sustainable Humanosphere, Kyoto University, ⁴Graduate School of Bioagricultural Science, Nagoya University)
- L9 Ligand-driven conformational changes of MurD characterized by paramagnetic NMR
Tomohide Saio¹, Kenji Ogura¹, Hiroto Yamaguchi², Hideki Tsujishita², ○Fuyuhiko Inagaki¹ (¹Faculty of Advanced Life Science, Hokkaido University, ²Shionogi Innovation Center for Drug Discovery, Shionogi & Co., Ltd)
- L10 Structure and dynamics of proteins based on the alignment tensors determined by TROSY
○Shin-ichi Tate^{1,2} (¹Department of Mathematics and Life Sciences, Hiroshima University, ²Research Center for the Mathematics on Chromatin Live Dynamics (RcMcD))

10:00 ~ 10:10 休憩/Break

10:10 ~ 11:10

Chairperson: Naoki Asakawa

- L11 Dissolution mechanism of carbonate in silicate melts: Information from *ab initio* calculations and ¹³C NMR measurements
○Xianyu Xue and Masami Kanzaki (Institute for Study of the Earth's Interior, Okayama University)
- L12 Microwave Heating NMR Spectroscopy. Application to Liquid Crystalline Systems
○Akira Naito¹, Yugo Tasei¹, Teruaki Fujito², and Izuru Kawamura¹ (¹Graduate School of Engineering, Yokohama National University, ²Probe Laboratory Inc.)
- L13 Precise Structure of *Bombyx mori* Silk Fibroin before and after Spinning determined by Solid state NMR
Tetsuo Asakura^{1,2}, ○Koji Yazawa^{1,3}, Keiko Okushita⁴, Yu Suzuki¹, Yasumoto Nakazawa¹, Akihiro Aoki¹, Katsuyuki Nishimura², Yusuke Nishiyama³, Hironori Kaji⁵ (¹Department of Biotechnology, Tokyo University of Agriculture and Technology, ²Institute for Molecular Science, ³JEOL RESONANCE Inc., ⁴National Defense Academy of Japan, ⁵Institute for Chemical Research, Kyoto University)

11:10 ~ 11:20 Break/休憩

11:20 ~ 12:00

Chairperson: Kiyonori Takegoshi

- IL6 *Invited Lecture 6*
Native Membrane Protein Structure in Lipid Bilayers Requires Solid State NMR
Nabanita Das^{1,2}, Dylan T. Murray^{1,2}, Yimin Miao^{1,3} and ○Timothy A. Cross^{1,2,3} (¹National High Magnetic Field Lab, Florida State University, ²Institute of Molecular Biophysics, Florida State University, ³Department of Chemistry & Biochemistry, Florida State University)

12:00 ~ 13:20 **Lunch/昼食**
日本核磁気共鳴学会 新評議員会・新理事会

13:20 ~ 14:00

Chairperson: Ichio Shimada

IL7 *Invited Lecture 7*

Environmentally-controlled protein/protein interactions:
Insights provided by NMR into nature's switches

Fernando Correa¹, Victor Ocasio¹, Giomar Rivera-Cancel¹, Laura B. Motta-Mena¹, Yirui Guo¹,
Thomas H. Scheuermann¹ and ○Kevin H. Gardner^{1,2} (¹UT Southwestern Medical Center,
²CUNY Advanced Science Research Center)

14:00 ~ 14:40

Chairperson: Shin-ichi Tate

IL8 *Invited Lecture 8*

Folding dynamics of topologically knotted proteins

○Shang-Te Danny Hsu (Institute of Biological Chemistry, Academia Sinica)

14:40 ~ 14:55 **Break/休憩**

14:55 ~ 15:35

Chairperson: Toshimichi Fujiwara

IL9 *Invited Lecture 9*

Solid-state NMR Spectroscopy of Membrane Proteins

○Stanley J. Opella (University of California, San Diego)

15:35 ~ 16:15

Chairperson: Masatsune Kainosho

IL10 *Invited Lecture 10*

Enhancing Signal and Contrast in MRI with Long-Lived Hyperpolarization or
Intermolecular Coherences

○Warren S. Warren (Departments of Chemistry, Radiology, Biomedical Engineering and
Physics, Duke University)

16:15 ~ 16:30 **Break/休憩**

16:30 ~ 17:10

Chairperson: Yasuhiko Yamamoto

HL1 *Honorary Lecture 1*

Personal Reminiscences on Helical Polymers by NMR

○Toshifumi Hiraoki (Graduate School of Engineering, Hokkaido University)

17:10 ~ 17:50

Chairperson: Akira Naito

HL2 *Honorary Lecture 2*

Why can F₀F₁ ATPsynthase rotate? / F₀F₁ ATP合成酵素はなぜ回る?

○Hideo Akutsu (Institute for Protein Research, Osaka University)

17:50 ~ 18:30

Chairperson: Tetsuo Asakura

IL11

Invited Lecture 11

Nuclear Magnetic Resonance: A Powerful Tool for Elucidating the Interplay between Structure and Dynamics of Soft Matter

○Hans W. Spiess (Max-Planck-Institute for Polymer Research)

18:30 ~ 19:00 **Break/移動・休憩**

19:00 ~ **Banquet/懇親会**

第3日目 11月14日(木) / Day 3 (Nov. 14, Thu)

9:00 ~ 9:40

座長 木川 隆則

- L14 高分子量蛋白質の立体構造解析に向けた新規SAILアミノ酸標識法の開発
New SAIL-NMR methods on structural analysis for large molecular protein
○宮ノ入 洋平¹, 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 構造生物学研究センター, 2首都大学東京 戦略研究センター, 3SAILテクノロジーズ株式会社, 4大阪大学 蛋白質研究所)
- L15 多剤耐性転写制御因子の運動性と薬剤認識機構のNMR解析
Dynamic drug recognition by multidrug-resistance transcriptional regulator
○竹内 恒¹, 嶋田 一夫² (1産業技術総合研究所 創薬分子プロファイリング研究センター, 2東京大学大学院 薬学系研究科)

9:40 ~ 10:20

座長 北原 亮

- L16 天然変性タンパク質のNMRによる揺らぎ構造解析
Dynamic structure of the intrinsically disordered proteins monitored by NMR
岡崎 萌花¹, 大堀 由佳¹, 幸元 雅也¹, 渡部 暁², 枡尾 尚哉², 西村 千秋¹ (1帝京平成大学 薬学部, 2理化学研究所)
- L17 抗体創薬への貢献を目指すNMR解析
NMR Analysis Aiming for Contribution to Antibody Therapeutics
鳥澤 拓也 (中外製薬株式会社 研究本部)

10:20 ~ 10:30 休憩/Break

10:30 ~ 11:10

座長 片平 正人

- L18 ヘムオキシゲナーゼ-2の天然変性領域による活性制御機構の解明
Regulation of heme oxygenase-2 activity elucidated by the analysis of structural dynamics
○古川 亜矢子¹, 山本 竜也^{2,3}, 末松 誠^{1,2,3}, 菅瀬 謙治¹ (1サントリー生命科学財団 生物有機科学研究所, 2慶応義塾大学 医学部, 3JST ERATO)
- L19 符号理論を応用した新規の安定同位体標識戦略
Novel Stable Isotope Labeling Strategy Using the Coding Theory
○葛西 卓磨¹, 小柴 生造^{1,2}, 横山 順^{1,3,4}, 木川 隆則^{1,3,5} (1理化学研究所 生命システム研究センター, 2東北大学 東北メディカル・メガバンク機構, 3理化学研究所イノベーション推進センター, 4太陽日酸株式会社 つくば研究所, 5東京工業大学 総合理工学研究科)

11:10 ~ 11:50

座長 伊藤 隆

- L20 ヒト脳内の高精度 *in vivo* ¹H スペクトロスコピー絶対定量化に関する検討
Error and Correction in Absolute Quantitation of Metabolites *in vivo* Using Water as Internal Reference
○渡邊 英宏, 高屋 展宏 (国立環境研究所 環境計測研究センター)

L21 ヒト in vivo 脳における鉄分布画像

In vivo iron mapping in human brain

○三森 文行, 渡邊 英宏, 高屋 展宏 (国立環境研究所 環境計測研究センター)

11:50 ~ 12:50 昼食/Lunch

12:50 ~ 14:20 ポスターセッション (奇数番号)
Poster Session (odd numbers)

14:20 ~ 14:30 休憩/Break

14:30 ~ 16:10 若手ポスター賞受賞講演

Short talks by Young Scientists Poster Award Winners

座長 河合 剛太, 藤原 敏道

16:10 ~ 16:20 休憩/Break

16:20 ~ 17:00

座長 出村 誠

L22 二次元ラプラス逆変換利用した緩和と拡散による材料解析

Material analysis based on NMR relaxation and diffusion using Laplace-Laplace inversion

○大窪 貴洋, 岩館 泰彦 (千葉大学大学院 工学研究科)

L23 光励起三重項電子スピンをを用いたDNPによる室温下での偏極率34%の達成

Room-temperature hyperpolarization of nuclear spins with DNP using photo-excited triplet electron spin

○立石 健一郎¹, 根来 誠², 西田 辰介³, 香川 晃徳², 森田 靖³, 北川 勝浩² (¹理化学研究所 仁科加速器研究センター, ²大阪大学大学院 基礎工学研究科, ³大阪大学大学院 理学研究科)

17:00 ~ 17:40

座長 武田 和行

L24 Al-MCM-41中の骨格内6配位Alの構造変化

Structure Change of Framework Octahedral Al species in Al-MCM-41

○高橋 利和¹, 岩浪 克之², 林 繁信³, 安田 弘之¹ (¹産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター, ²茨城工業高等専門学校 物質工学科, ³産業技術総合研究所 計測フロンティア研究部門)

L25 トリメチルホスフィンオキsidを用いたZSM-5型ゼオライトの酸性質の評価

Evaluation of Acid Properties of ZSM-5 Type Zeolite Probed by Trimethylphosphine Oxide

○林 繁信, 治村 圭子, 小島 奈津子 (産業技術総合研究所 計測フロンティア研究部門)

17:40 ~ 17:45

閉会の挨拶 水野 元博 (第52回NMR討論会世話人代表)

Closing Remarks: Motohiro Mizuno (Organizer of the 52nd Annual Meeting of The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan)