

13-1 NMR 研究会

計算科学と NMR

＜趣旨＞ NMR 分光法は、構造解析や分子運動解析にその威力を発揮し、基礎から応用開発研究まで必須の機器分析法として活躍しています。NMR 法が発展してきた背景には、計算機（コンピュータ）の飛躍的な処理速度の向上が大きく寄与しています。例えばフーリエ変換 NMR の黎明期では、1 本の FID からフーリエ変換処理によって 1 次元スペクトルを得るのが 1 日仕事だったことを考えると隔世の感があります。また、現在では MO（分子軌道法）や量子化学計算法を用いた化学シフト計算は広く行われており、実測の NMR 化学シフトスペクトルの解釈だけでなく、実測だけでは得られない構造に関する知見を与える有力な手段となっています。今回の NMR 研究会では、「計算科学」をキーワードに、NMR の原理から応用まで幅広い分野で計算科学を利用している先生方を講師としてお迎えし、NMR と計算科学の関わりについて議論していただく場を設けます。今回の研究会が、皆様の研究の幅を広げることにつながる討論と交流の場として、大いに活用されることを期待いたします。また、あわせてポスター発表の機会を今年も設けました。主題に関連する分野に限らず、様々な分野から、完成された研究内容だけでなく、研究途中の成果であっても活発な議論が湧き起こる内容のポスター発表をしていただきます。奮ってご参加ください。

主 催 高分子学会 NMR 研究会

協 賛 日本化学会 日本核磁気共鳴学会 日本分析化学会

日 時 2013 年 5 月 17 日（金） 10:00～17:00

会 場 東京工業大学(大岡山キャンパス)西9号館デジタル多目的ホール(東京都目黒区大岡山 2-12-1)

http://www.titech.ac.jp/about/campus/o_map.html

http://www.titech.ac.jp/about/campus/o_illustr.html?id=03

交 通 東急目黒線・東急大井町線 大岡山駅下車徒歩約5分

<http://www.titech.ac.jp/about/campus/index.html>

プログラム

10:00～11:00 Non-uniform sampling と信号再構成法による測定時間短縮の試み（首都大学東京）池谷鉄兵

11:00～12:00 NMR と計算科学の相補的利用による高分子の特性解析と分子設計（千葉大学）笹沼祐二

13:00～15:00 ポスター発表

15:00～15:40 量子化学計算を用いたポリ乳酸の立体規則性解析（帝人）菅沼こと

15:40～16:40 固体 NMR および量子化学計算を併用した構造解析（奈良女子大学）黒子弘道

16:40～17:00 若手ポスター賞表彰式

ポスター発表プログラム

P1.固体 ^{13}C NMR 法を用いた家蚕絹の分子間構造解析

(農工大院工)○奥下慶子, (農工大工)小川達也・青木昭宏, (農工大工・分子研)朝倉哲郎

P2.パイ共役系高分子デバイスを対象とした周波数可変磁気共鳴装置の開発（群馬大院工）○福田國統・浅川直紀

P3.アルキル側鎖を有する液晶性ポリエステル磁場の配向構造の固体 ^{13}C NMR 法による研究Ⅱ

(名工大院工)○浅沼諒太・吉水広明

P4.秩序構造が配向した高分子試料における気体拡散特性の NMR 法による研究

(名工大院工)○岩本純・島崎彩奈・吉水広明

P5.フィルム形状の高分子に収着した気体の NMR スペクトルを観察する際の諸条件について

(名工大院工)○樋口智章・吉水広明

P6.メタクリルポリマーにおける気体収着時の局所分子運動性に関する NMR 法による研究

(名工大院工)○萬濃香穂・吉水広明

P7.気体の収着による高分子の局所分子運動性変化の NMR 法による観察

(名工大院工)○山内雅弘・神谷佳世・吉水広明

P8.量子化学計算によるバナナ型液晶分子の構造解明

(東工大工)○服部将也, (東工大院工)白田圭・山田和彦・渡辺順次・川内進

P9.CLEAN 信号再生法による測定時間短縮の試み

(アジレントテクノロジー)○栗田順一・芦田淳

P10.固体高分解能 NMR 法によるゴム材料の伸長過程の運動性変化の解析

(防衛大応化)○北村成史・浅野敦志・黒津卓三

P11.MALDI-MS と NMR の相関分析による新規ポリアミンの構造解析

(徳島大学大学院 STS)○押村美幸・本山敬悟, (ローディア ジャパン)北山浩之・池田喜彦

(徳島大学大学院 STS)右手浩一

P12.NMR スペクトルの多変量解析によるポリ乳酸の立体規則性解析(2) (徳島大院 STS)○平野朋広・八幡莉紗

(農工大院工・帝人)菅沼こと, (農工大院工)朝倉哲郎, (徳島大院 STS)押村美幸・右手浩一

P13.クライオ NMR による微量二重結合の定量検討 (三井化学分析センター)○茂呂ふみか・佐藤浩子・恩田光彦

P14.ラテックス ^{13}C -NMR 法による水素化天然ゴムのキャラクタリゼーション

(長岡技科大材料)○金田圭介, (長岡技科大)河原成元

P15.ラテックス ^{13}C -NMR 法による加硫ポリイソプレンゴムの構造解析

(長岡技科大材料)○磯憲明, (長岡技科大)河原成元

P16.炭化水素系燃料電池膜 SPESK の劣化解析

(東レリサーチ)○高崎万里・木村一雄・中川善嗣・佐藤信之, (山梨大)BaeByungchan・宮武健治・渡辺政廣

P17.Structural Characterization of MaFunori extracted from red seaweed through NMR Spectroscopy

(Dept. of Mat. Sci.&Tech., Nagaoka Univ. of Tech.)ONguyen Thu Ha

(Independent Admi. Inst. National Res. Inst. for Cultural Properties)Noriko Hayakawa

(Dept. of Mat. Sci. & Tech., Nagaoka Univ. of Tech.)Seiichi Kawahara

(Dept. of Polym. Chem., Tokyo Inst. of Tech.)Riichiro Chujo

P18.溶液 NMR を用いたポリカーボネート樹脂中の難燃剤の定量

(出光興産)○古川諒一

P19.ポリアラニン配列を有するエリ蚕およびクモ絹の NMR 精密構造解析

(農工大院工)○河西 秀和・宮澤健太・鈴木悠・中澤靖元・朝倉哲郎

参加要領

1) 定員 200 名

2) 参加費 ①企業 5,250 円 ②大学・官公庁 3,150 円 ③学生 2,100 円 ④名誉・終身・フェロー・ゴールド・シニア会員 2,100 円 ⑤NMR 研究会メンバー 無料

3) 申込方法 高分子学会ホームページ (<http://www.spsj.or.jp/entry/>) からお申込みの上、参加費を 5 月末日までにご送金下さい。参加証、請求書(希望者のみ)を送付いたします。

参加証、請求書(希望者のみ)を送付いたします。参加費は、お振込みをお願いいたします。当日のお支払いはできません。

4) 振込先 銀行振込<三菱東京 UFJ 銀行 銀座支店(普通) 1126232 名義 公益社団法人 高分子学会>
郵便振替<00110-6-111688 名義 公益社団法人 高分子学会>
振込み手数料はご負担くださいますようお願いいたします。

5) その他 演題・講演者は予告なく変更になる場合がございます。予めご了承下さい。

問合せ先

〒104-0042 東京都中央区入船 3-10-9 新富町ビル
公益社団法人 高分子学会 13-1 NMR 研究会係
TEL 03-5540-3770 FAX 03-5540-3737

行事参加申込 QR コード
<http://www.spsj.or.jp/entry/>

