

第53回 NMR 討論会 (2014)

The 53rd Annual Meeting of The Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan

会 期： 2014年11月4日 (火)～6日 (木)
November 4 (Tue)–6 (Thu), 2014
会 場： 大阪大学コンベンションセンター
Osaka University Convention Center
〒565-0871 大阪府吹田市山田丘1-1

Poster Session

第1日目 11月4日(火) / Day 1 (Nov. 4, Tue)

9:00 ~ 9:10

開会の挨拶 内藤 晶 (日本核磁気共鳴学会会長)

Opening remarks: Akira Naito (President of the Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan)

一般講演1 [会場：MOホール]

9:10 ~ 9:50 座長：池上 貴久

9:10 ~ 9:30

L1-1 Dynamic nuclear polarisation enhanced solid-state NMR spectroscopy and magnetic resonance force microscopy for structural biology

○ Hiroki Takahashi^{1,2}, Brad Moores¹, Romana Schirhagl¹, Daniel Lee², Jean-Pierre Simorre³, Michel Bardet², Sabine Hediger², Gaël De Paëpe² and Christian Degen¹ (¹Department of Physics, ETH Zurich, Switzerland, ²Laboratoire de Chimie Inorganique et Biologique, CEA Grenoble, France, ³Institut de Biologie Structurale, France)

9:30 ~ 9:50

L1-2 多孔質機能性物質の1粒子分析：超偏極¹²⁹Xeを利用した1粒子スペクトロスコピーと1粒子イメージング

Single particle analysis of porous functional materials: ¹²⁹Xe single particle spectroscopy and imaging utilizing hyperpolarized gas

○ 藤原 英明¹, 今井 宏彦^{2,1}, 武田 和行³, 木村 敦臣¹ (¹大阪大学大学院 医学系研究科, ²京都大学大学院 情報学研究科, ³京都大学大学院 理学研究科)

9:50 ~ 10:00 休憩/Break

一般講演2 [会場：MOホール]

10:00 ~ 11:00 座長：上田 貴洋

10:00 ~ 10:20

L1-3 パイ共役系高分子の分子ダイナミクス計測と生体模倣型信号処理デバイスへの応用
Molecular dynamics of π -conjugated polymers and application to bioinspired signal processing devices

○ 浅川 直紀¹, 梅村 香一郎¹, 藤瀬 晋也¹, 大野 雄太¹, 福田 國統¹, 矢澤 宏次², 清水 禎³, 丹所 正孝³, 神吉 輝夫⁴, 田中 秀和⁴ (¹群馬大学大学院 理工学府, ²JEOL RESONANCE Inc., ³物質・材料研究機構, ⁴大阪大学 産業科学研究所)

10:20 ~ 10:40

L1-4 高温超伝導バルク磁石と高次シムコイルを用いた高分解能NMR/MRIの実現
High resolution NMR/MRI using a high T_c bulk superconducting magnet with a higher-order shim coil

○玉田 大輝^{1,2,3}, 巨瀬 勝美¹, 柳 陽介⁴, 伊藤 佳孝⁴, 仲村 高志³ (筑波大学大学院 数理工学物質科学研究科 電子・物理工学専攻, ²日本学術振興会特別研究員, ³理化学研究所, ⁴(株)イムラ材料開発研究所)

10:40 ~ 11:00

L1-5 ^{6/7}Li 固体NMRを用いたコバルト酸リチウムの欠陥部位の構造解析
Local structure at defect in lithium overstoichiometric LiCoO₂ as studied by ^{6/7}Li solid-state NMR

○村上 美和¹, 野田 泰斗², 小山 幸典¹, 竹腰 清乃理², 荒井 創¹, 内本 喜晴³, 小久見 善八¹ (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)

11:00 ~ 12:00 座長：加藤 晃一

11:00 ~ 11:20

L1-6 多成分脂質膜のCSA測定
CSA measurement of multi-component lipid membrane by centerband-only analysis of spin echo

○松岡 茂^{1,2}, 梅川 雄一^{1,2}, 村田 道雄^{1,2} (大阪大学大学院 理学研究科, ²科学技術振興機構 ERATO)

11:20 ~ 11:40

L1-7 家蚕絹 Silk II型構造の解析とモルフォロジーに関する研究
NMR study for elucidating Silk II structure of *Bombyx mori* silk fibroin and its morphology

○奥下 慶子¹, 浅野 敦志², ウィリアムソン マイク³, 朝倉 哲郎¹ (東京農工大学大学院 工学研究院, ²防衛大学校 応用科学科, ³シェフィールド大学 分子生物バイオテクノロジー学科)

11:40 ~ 12:00

L1-8 固体MAS NMRによる細胞膜環境中での7本膜貫通型光受容膜タンパク質の構造解析
Conformation of seven-helical transmembrane photoreceptor membrane protein as studied by solid-state MAS NMR

○川村 出¹, 中谷 聡志¹, 榎野 義輝¹, 加茂 直樹², 内藤 晶¹ (横浜国立大学大学院 工学府, ²北海道大学)

公募型シンポジウム1 [会場：会議室2 / Conference Room 2]

10:00 ~ 12:00

高度な安定同位体標識が拓くNMR技術の展開
The expansion of NMR spectroscopy by elaborated stable isotope labeling

座長：竹内 恒, 宮ノ入 洋平

10:00 ~ 10:05 開会あいさつ：竹内 恒

座長：竹内 恒 (産業技術総合研究所)

10:05 ~ 10:17

SL1-1 植物培養細胞を用いた標識試料の調製方法とその応用例
A method to prepare labeled proteins using suspension cultured plant cells and some examples of its application

○大木 進野 (北陸先端科学技術大学院大学 ナノマテリアルテクノロジーセンター)

10:17 ~ 10:29

SL1-2 メチルTROSY法による膜タンパク質の機能調節メカニズムの解明
Functional mechanism of membrane proteins revealed by methyl TROSY

○大澤 匡範¹, 今井 駿輔¹, 竹内 恒², 嶋田 一夫¹ (¹東京大学大学院 薬学系研究科, ²産業技術総合研究所 創薬分子プロファイル研究センター)

10:29 ~ 10:41

SL1-3 高難度タンパク質のNMR解析に向けた酵母発現系の活用
Utilization of yeast expression systems for stable isotope-assisted NMR analysis of difficult proteins

○高橋 栄夫¹, 大浪 真由美², 杉木 俊彦², 坂倉 正義¹, 竹内 恒³, 嶋田 一夫⁴ (¹横浜市立大学大学院 生命医科学研究科, ²バイオ産業情報化コンソーシアム, ³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, ⁴東京大学大学院 薬学系研究科)

10:41 ~ 10:53

SL1-4 安定同位体標識のための無細胞タンパク質合成系の改良
Improvement of cell-free protein synthesis system for the stable isotope-labeling

○横山 順^{1,2}, 樋口 佳恵², 松田 夏子², 木川 隆則^{2,3,4} (¹大陽日酸株式会社つくば研究所, ²理化学研究所イノベーション推進センター, ³理化学研究所 生命システム研究センター, ⁴東京工業大学大学院 総合理工学研究科)

10:53 ~ 11:05

SL1-5 哺乳細胞による安定同位体標識の抗体創薬への利用
Applications of stable isotope labeling by mammalian cells to antibody therapeutics

○鳥澤 拓也 (中外製薬株式会社研究本部)

11:05 ~ 11:10 休憩/Break

座長：宮ノ入 洋平 (名古屋大学)

11:10 ~ 11:22

SL1-6 誤り検出符号によるノイズに強いアミノ酸選択標識法
Noise-tolerant amino-acid selective stable isotope labeling with error detection system

○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大陽日酸株式会社つくば研究所, ⁵東京工業大学大学院 総合理工学研究科)

11:22 ~ 11:34

SL1-7 精製蛋白質への標識導入技術の開発

○児嶋 長次郎 (大阪大学 蛋白質研究所)

11:34 ~ 11:46

SL1-8 微生物および植物バイオマスへの固体・溶液NMR解析
Microbial and plant biomass analysis by solid and solution-NMR

○菊地 淳^{1,2,3} (¹理化学研究所 環境資源科学研究センター, ²名古屋大学大学院 生命農学研究科, ³横浜市立大学大学院 生命医科学研究科)

11:46 ~ 11:58

SL1-9 タンパク質NMRの生体系への応用：新規MRI及びin-cell NMR法

Stable isotope-assisted NMR in living systems: novel MRI and in-cell NMR techniques

李 真和¹, 榎園 能章², 猪股 晃介³, 山田 久嗣⁴, 今井 宏彦⁵, 牧野 顕⁶, 木村 俊作⁷, 松田 哲也⁵, 近藤 輝幸⁴, 白川 昌宏¹, 〇枋尾 豪人² (1京都大学大学院 工学研究科, 2京都大学大学院 理学研究科 生物物理専攻, 3理化学研究所, 4京都大学大学院 工学研究科 物質エネルギー化学専攻, 5京都大学大学院 情報学研究科, 6福井大学 高エネルギー医学研究センター, 7京都大学大学院 工学研究科 材料化学専攻)

11:58 ~ 12:00 結語：宮ノ入 洋平

12:10 ~ 12:40 日本核磁気共鳴学会総会/Meeting of the NMR Society of Japan [会場：MOホール]

12:50 ~ 13:40 昼食/Lunch

ランチオンセミナー /Luncheon Seminar [会場：MOホール]

<株式会社JEOL RESONANCE>

新技術紹介 新型NMR装置 [NMR spectrometer ZETA]

－世界最高性能のNMR分光計と溶液・固体プローブ－

内海 博明 (ソリューション・マーケティング部)

13:40 ~ 15:10 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 ~ 16:40 ポスター賞プレビュー /Poster Awards Preview

[A会場：MOホール / Room A：MO Hall]

15:20 ~ 15:30

P8 MAPキナーゼ p38 α のストレスシグナル伝達機構の解明

Structural basis for the stress signal transduction via MAP kinase p38 α

〇徳永 裕二¹, 竹内 恒², 高橋 栄夫³, 嶋田 一夫⁴ (1JBiC 次世代天然物化学技術研究組合, 2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, 3横浜市立大学 生命医科学研究科, 4東京大学大学院 薬学系研究科)

15:30 ~ 15:40

P10 人工 ligase ribozyme の活性部位のNMR解析

NMR analysis of the catalytic site in an artificial ligase ribozyme

〇星野 啓治¹, 目谷 太樹¹, 井川 善也², 坂本 泰一¹ (1千葉工業大学, 2富山大学)

15:40 ~ 15:50

P12 ユビキチン化に伴うタンパク質構造不安定化

Folding destabilization of a protein by ubiquitylation

〇森本 大智¹, ヴァーリンド エリック¹, 菅瀬 謙治², 深田 はるみ³, 曾 友深⁴, 蔭山 俊^{4,5}, 星野 大⁶, 藤井 高志⁷, 土屋 光⁸, 佐伯 泰⁸, 有田 恭平⁹, 有吉 眞理子¹⁰, 枋尾 豪人¹⁰, 岩井 一宏¹¹, 難波 啓一^{7,12}, 小松 雅明^{4,5}, 田中 啓二⁸, 白川 昌宏¹ (1京都大学大学院 工学研究科, 2公益財団法人サントリー生命科学財団 生物有機化学研究所, 3大阪府立大学大学院 生命環境科学研究科, 4公益財団法人東京都医学総合研究所 蛋白質リサイクルプロジェクト, 5新潟大学大学院 歯学総合研究科, 6京都大学大学院 薬学研究科, 7独立行政法人理化学研究所 生命システム研究センター, 8公益財団法人東京都医学総合研究所 蛋白質代謝研究室, 9横浜市立大学大学院 生命医科学研究科, 10京都大学大学院 理学研究科, 11京都大学大学院 医学研究科, 12大阪大学大学院 生命機能研究科)

15:50 ~ 16:00

- P58 水分子のNMRダイナミクス解析を用いた高分子と水の相互作用に関する研究
NMR dynamics analysis of water molecules for studying interaction between polymer and water molecule
○亀谷 俊輔¹, 岩本 脩成², 関根 素馨¹, グレゴリー ボウティス³, 大窪 貴洋⁴, 朝倉 哲郎² (¹三井化学分析センター, ²東京農工大学大学院 工学府, ³ニューヨーク市立大学シティカレッジ物理, ⁴千葉大学大学院 工学研究科)

16:00 ~ 16:10

- P76 グリーンレーザーを用いたアロディニア特異的な痛み応答に関するfMRI研究
An fMRI study of allodynic pain evoked by green laser stimuli
○杠 直哉¹, 吉永 壮佐¹, 平金 真¹, 木村 一成¹, 岩本 成人¹, 佐藤 博司¹, 寺沢 宏明¹ (¹熊本大学大学院 生命科学研究部 構造生命イメージング分野, ²ブルカー・バイオスピン株式会社 アプリケーション部)

16:10 ~ 16:20

- P90 グラフ・ネットワーク理論による代謝混合物の未知シグナル帰属支援
Supporting for assignment of unknown metabolites signals by graph and network theory
○伊藤 研悟^{1,2}, 小松 功典^{1,2}, 伊達 康博^{1,2}, 菊地 淳^{1,2,3,4} (¹横浜市立大学大学院 生命医科学研究科, ²独立行政法人理化学研究所 環境資源科学研究センター, ³独立行政法人理化学研究所 バイオマス工学研究プログラム, ⁴名古屋大学大学院 生命農学研究科)

16:20 ~ 16:30

- P96 エリ蚕絹を用いた再生医療材料開発のためのNMR構造解析
NMR structure analysis of *S.c. ricini* silk fibroin for tissue engineering
○河西 秀和¹, 鈴木 悠², 山崎 俊正³, 齊藤 準⁴, 朝倉 哲郎¹ (¹東京農工大学大学院 工学府, ²福井大学テニユアトラック推進本部, ³農業生物資源研究所, ⁴京都工芸繊維大学大学院 工芸科学研究科)

[B会場：会議室2 / Room B : Conference Room 2]

15:20 ~ 15:30

- P48 単一細胞あたりの特定タンパク質の分子数計測のための定量固体NMR法の開発
Quantitative solid-state NMR method for counting the number of a protein molecule in a cell
○山田 和哉, 江川 文子, 藤原 敏道 (大阪大学 蛋白質研究所)

15:30 ~ 15:40

- P52 *In situ* 光照射固体NMRによる光受容センサー膜タンパク質 sensory rhodopsin I の波長依存的な光反応過程の解析
Color-discriminating photocycle of sensory rhodopsin I as revealed by *in situ* photo irradiation solid-state NMR
○楨野 義輝¹, 四方田 洋樹¹, 友永 雄也¹, 日高 徹朗¹, 川村 出¹, 沖津 貴志², 和田 昭盛², 須藤 雄気³, 内藤 晶¹ (¹横浜国立大学大学院 工学府, ²神戸薬科大学, ³岡山大学大学院 医歯薬学総合研究科)

15:40 ~ 15:50

- P54 家蚕絹の繊維化後構造と再生医療材料の開発に関するNMR研究
NMR studies on structure of *Bombyx mori* silk fibroin after spinning and development of silk for biomaterial.
○新井 裕喜¹, 大畑 卓也¹, 奥下 慶子¹, 青木 昭宏¹, Anne S. Ulrich², 朝倉 哲郎¹ (¹東京農工大学大学院 工学府, ²カールスルーエ大学 生物化学部)

15:50 ~ 16:00

- P60 逆ラプラス変換法によるゴム材料の T_2 緩和時間分布解析
The T_2 relaxation distribution of rubber materials estimated by the inverse Laplace transform
○角村 将希¹, 奥下 慶子², 大窪 貴洋³, 浅野 敦志¹ (¹防衛大学校 応用化学科, ²東京農工大学大学院 工学研究科, ³千葉大学大学院 工学研究科)

16:00 ~ 16:10

- P64 天然存在比下での³³S STMASによるエトリンタイトの研究
A natural abundance ³³S STMAS NMR study of ettringite
○佐々木 彬子, Stephen Wimperis (英国グラスゴー大学大学院)

16:10 ~ 16:20

- P66 固体NMRによるキンヒドロロン合成時の固相反応過程の研究
Solid-state NMR on solid-state reaction process of quinhydrone
○伊澤 研一郎, 野田 泰斗, 竹腰 清乃理 (京都大学大学院 理学研究科)

16:20 ~ 16:30

- P68 核磁気共鳴法によるCsの粘土シートへの吸着挙動解析
Solid-state analysis on behavior of adsorption of Cs in clays
○茨城 萌¹, 大窪 貴洋¹, 岩館 泰彦¹, 出口 健三², 大木 忍², 清水 禎² (¹千葉大学大学院 工学研究科, ²物質・材料研究機構)

16:30 ~ 16:40

- P78 7CB/*n*-heptane 二成分液晶における*n*-heptaneの配向性とダイナミクス
Orientation and dynamics of *n*-heptane in 7CB/*n*-heptane system
○熊谷 翼秀, 大橋 竜太郎, 井田 朋智, 水野 元博 (金沢大学大学院 自然科学研究科)

[C会場：会議室3 / Room C : Conference Room 3]

15:20 ~ 15:30

- P40 磁場配向微結晶粉末を用いた単結晶NMR測定
Single-crystal NMR measurement by using magnetically oriented microcrystal array
○木全 美香子, 久住 亮介, 木村 史子, 木村 恒久 (京都大学大学院 農学研究科)

15:30 ~ 15:40

- P42 磁場配向微結晶試料を用いたセロビオースの単結晶NMR解析
Single-crystal NMR study of ¹³C chemical shift tensor of cellobiose via magnetically oriented microcrystal array
○宋 广杰¹, 久住 亮介¹, 木村 史子¹, 木村 恒久¹, 出口 健三², 大木 忍², 藤戸 輝昭², 清水 禎² (¹京都大学大学院 農学研究科, ²物質・材料研究機構)

15:40 ~ 15:50

- P44 マイクロ波照射NMRによる液晶分子のマイクロ波高温および高速加熱現象の解明
Analysis of high temperature and fast heating processes of liquid crystalline molecules by microwave irradiation NMR spectroscopy
○田制 侑悟¹, 谷川 文一¹, 川村 出¹, 佐藤 元泰², 内藤 晶¹ (¹横浜国立大学大学院 工学府, ²中部大学 工学研究科)

15:50 ~ 16:00

- P46 Measurement of proton chemical shift anisotropy tensors using symmetry-based radio-frequency pulse sequences and ultrafast MAS solid-state NMR spectroscopy
○Manoj Kumar Pandey¹, Michal Malon^{1,2} and Yusuke Nishiyama^{1,2} (¹CLST NMR Facility, RIKEN, ²JEOL RESONANCE Inc.)

16:00 ~ 16:10

- P86 高速高磁場DNP効率シミュレーション計算
Fast calculation of solid-state DNP effectiveness under magic-angle spinning
○深澤 隼, 藤原 敏道, 松木 陽 (大阪大学蛋白質研究所)

16:10 ~ 16:20

- P88 指数窓によるCS法のNMRスペクトル復元精度の改善
To improve accuracy reconstructed the NMR spectrum with the compressed sensing using the exponential window
○田中 勇帆¹, 中尾 朋喜¹, 濱津 順平², 泉 顕也², 古川 利博¹ (¹東京理科大学 工学研究科, ²株式会社 JEOL RESONANCE)

16:20 ~ 16:30

- P92 汎用デジタル機器とArduino Dueを用いたデジタルMRIシステムの開発
Development of a digital MRI system using general purpose digital units and board computers "Arduino Due"
○津田 真人, 玉田 大輝, 寺田 康彦, 巨瀬 勝美 (筑波大学大学院 数理物質科学研究科)

16:30 ~ 16:40

- P94 ダイヤモンドスピンをを用いた生体内ジャイロセンシング技術の開発
Nanoscale gyroscope for measurements of cellular dynamics *in vivo* using diamond spins
○久美屋 雄太¹, 五十嵐 龍治¹, 杉 拓磨^{2,3}, 外間 進悟¹, 朽尾 豪人¹, 吉成 洋祐², 原田 慶恵², 白川 昌宏^{1,2} (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科学技術振興機構 さきがけ)

17:30 ~ 日本核磁気共鳴学会 評議員会・新評議員会・新理事会 開場
[会場：研修室 (コンベンションセンター1階)]

18:00 ~ 21:00 日本核磁気共鳴学会 評議員会・新評議員会・新理事会
(総会で承認された新評議員も出席の必要があります。また、新理事会は新評議員会が終わりしだい開きます)

第2日目 11月5日(水) / Day 2 (Nov. 5, Wed) English lectures

一般講演3 [Room : Conference Room 2 / 会議室2]

9:00 ~ 10:00 Chairperson: Toshio Yamazaki

9:00 ~ 9:20

L2-1 Sulfur-33 NMR of organic solids

○Kazuhiko Yamada¹, Daisuke Aoki², Kentaro Kitagawa³, Hiromitsu Sogawa², Masato Takahashi³, and Toshikazu Takata² (¹Science Research Center, Kochi University, ²Department of Organic and Polymeric Materials, Tokyo Institute of Technology, ³Graduate School of Integrated Arts and Sciences, Kochi University, ⁴Center for Life Science Technologies, RIKEN)

9:20 ~ 9:40

L2-2 Proton decoupling and recoupling under double-nutation irradiation

○Kazuyuki Takeda¹, Asato Wakisaka¹, K. Takegoshi¹ (¹Division of Chemistry, Graduate School of Science, Kyoto University)

9:40 ~ 10:00

L2-3 Studies of minute quantities of surface-bound molecules using 2D heteronuclear correlation spectroscopy under 100 kHz MAS

○Yusuke Nishiyama^{1,2}, Takeshi Kobayashi³, Michal Manon^{1,2}, Igor I. Slowing^{3,4}, and Marek Pruski^{3,4} (¹JEOL RESONANCE Inc., ²RIKEN CLST NMR facility, ³U.S. DOE Ames Laboratory, ⁴Department of Chemistry, Iowa State University)

10:00 ~ 11:00 Chairperson: Tetsuo Asakura

10:00 ~ 10:20

L2-4 Imaging mice with using vertical superconducting magnets for NMR

○Tomoyuki Haishi (MRTechnology, Inc., Tsukuba, Ibaraki, JAPAN)

10:20 ~ 10:40

L2-5 Water flow in mantle cavity of bivalves analyzed by 7 T NMR microimaging

○Yoshiteru Seo¹, Eriko Seo², Masataka Murakami³, Kazue Ohishi⁴, Tadashi Maruyama⁴ (¹Dokkyo Medical University School of Medicine, ²Atmosphere and Ocean Research Institute, University of Tokyo, ³National Institute for Physiological Sciences, ⁴Institute of Biogeosciences, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology)

10:40 ~ 11:00

L2-6 Characterization of elusive electronic state of ferrous high-spin ($S = 2$) heme in deoxy myoglobin

Liyang Xu¹, Ryu Nishimura¹, Tomokazu Shibata¹, Yasuhiko Yamamoto¹, Akihiro Suzuki², and Saburo Neya³ (¹Graduate School of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba, ²Department of Materials Engineering, Nagaoka National College of Technology, ³Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Chiba University)

Open Symposium 2 [Room : MO Hall / MOホール]

9:00 ~ 11:00

“*in situ* structural biology” opened up by in-cell NMR
In-cell NMRが切り拓く「*in situ*構造生物学」

Chairpersons: Masahiro Shirakawa, Yutaka Ito, Takanori Kigawa

9:00 ~ 9:20

SL2-1 Protein dynamics in crowded environment

○Takanori Kigawa^{1,2} (¹RIKEN Quantitative Biology Center, ²RIKEN Innovation Center)

9:20 ~ 9:40

SL2-2 *In situ* structural biology by NMR

○Yutaka Ito^{1,2} (¹Department of Chemistry, Tokyo Metropolitan University, ²CREST/JST)

9:40 ~ 10:00

SL2-3 Cell biology by optically detected magnetic resonance (ODMR) spectroscopy

Ryuji Igarashi¹, Yuta Kumiya^{1,2}, Takuma Sugi³, Shingo Sotoma¹, Kazuhiro Ikeda⁴, Hitoshi Sumiya⁴, Hidehito Tochio¹, Yohsuke Yoshinari^{2,5}, Yoshie Harada², ○Masahiro Shirakawa¹
(¹Graduate School of Engineering, Kyoto University, ²Institute for Integrated Cell-Material Sciences, Kyoto University, ³JST, PRESTO, ⁴Advanced Materials R&D Laboratories, Sumitomo Electric Industries, Ltd., ⁵JEOL Ltd.)

10:00 ~ 10:30

SL2-4 In-cell thermodynamics-curvatures and transient interactions

○Jens Danielsson (Department of Biochemistry and Biophysics, Stockholm University, Sweden)

10:30 ~ 11:00

SL2-5 In-cell NMR spectroscopy of larger proteins and complexes

Robert Hänsel¹, Laura M. Luh¹, Sina Reckel¹, Ivan Corbeski¹, Frank Löhr¹, Lukas Trantirek² and ○Volker Dötsch¹ (¹Institute of Biophysical Chemistry, University of Frankfurt, Frankfurt, Germany, ²Central European Institute of Technology, Masaryk University, Brno, Czech Republic)

11:00~11:10 Break/休憩

Invited Lecture [Room : MO Hall / MOホール]

11:10 ~ 11:45 Chairperson: Yoh Matsuki

IL1 Recent advances in nanoscale MRI

○Christian Degen (Department of Physics, ETH Zurich, Zurich, Switzerland)

11:45 ~ 12:20 Chairperson: Michio Murata

IL2 Solid-state NMR for investigating membrane-curvature induction by viral proteins

Hongwei Yao, Tuo Wang, Byungsu Kwon, and ○Mei Hong (Department of Chemistry, MIT, Cambridge, MA, USA)

- 12:30 ~ 13:20 **Lunch/昼食**
Luncheon Seminar/ランチオンセミナー [Room : MO Hall / MOホール]
< Agilent Technologies Japan, Ltd. >
“Agilent total solution for protein structural analysis”
- Session 1
Structural analysis of protein by HPLC-coupled mass spectrometry,
improvement of sensitivity and reproducibility
Hiroyuki Fukuda
- Session 2
Multidimensional NMR data processing software VnmrJ,
integrated nmrPipe environment
Junichi Kurita
- Session 3
X-ray Crystallography @ own lab, novel *in situ* X-ray screening,
bullet structure analysis and ultra-high resolution structure elucidation
Takashi Sato

Honorary Lecture

- 13:30 ~ 14:05 **Chairperson: Gohta Kawai**
HL1 NMR structural biology on transcription factors and chromatin-related proteins
○Yoshifumi Nishimura (Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University)
- 14:05 ~ 14:40 **Chairperson: Yutaka Ito**
HL2 Analytical and biotechnological applications of NMR
○Ei-ichiro Suzuki (Japan Biological Informatics Consortium Research Institute; Graduate School of Agricultural and Life Sciences, University of Tokyo; Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University)
- 14:40 ~ 14:55 **Break/休憩**

Invited Lecture

- 14:55 ~ 15:30 **Chairperson: Ichio Shimada**
IL3 Substrate- and ligand-modulated conformational dynamics of membrane solute carriers revealed by NMR
Sven Brueschweiler¹, Qin Yang¹, Marcelo J. Berardi¹, and ○James J. Chou^{1,2} (¹Harvard University Medical School, Boston, USA, ²National Center for Protein Science, Shanghai, China)
- 15:30 ~ 16:05 **Chairperson: Yoshichika Yoshioka**
IL4 Magnetic resonance imaging in real time
○Jens Frahm (Biomedizinische NMR Forschungs GmbH am Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie, Göttingen, Germany)
- 16:05 ~ 16:20 **Break/休憩**

Invited Lecture

16:20 ~ 16:55 **Chairperson: Kiyonori Takegoshi**

IL5 Metabolism and microarchitecture from advanced ^1H and ^{13}C NMR spectroscopy and imaging

Noam Shemesh¹, Jens T. Rosenberg², Jean-Nicolas Dumez¹, Avigdor Leftin¹, Tangi Roussel¹, Rita Schmidt¹, Hadassa Degani¹, Samuel C. Grant² and ○Lucio Frydman^{1,2} (¹Weizmann Institute, Rehovot, Israel, ²National High Magnetic Field Lab, Tallahassee, Florida, USA)

16:55 ~ 17:30 **Chairperson: Akira Naito**

IL6 Solid state NMR of disease-associated proteins: methods and results

Marvin Bayro, Jun-Xia Lu, Eric Moore, Dylan Murray, Alexey Potapov, Kent Thurber, Wai-Ming Yau, and ○Robert Tycko (Laboratory of Chemical Physics, National Institute of Diabetes and Digestive and Kidney Diseases, National Institutes of Health, Bethesda, Maryland, USA)

17:30 ~ 18:30 **Break & Transfer by Chartered Bus or Monorail / 休憩・移動**

18:30 ~ 20:30 **Banquet [Place: Hotel Hankyu Expo Park]**

懇親会 [会場：ホテル阪急エキスポパーク]

第3日目 11月6日(木) / Day 3 (Nov. 6, Thu)

一般講演4 [会場：MOホール]

9:00 ~ 10:00 座長：西村 重徳

9:00 ~ 9:20

L3-1 Error analysis of NMR parameters in equilibrium systems

○Rieko Ishima (Department of Structural Biology, University of Pittsburgh School of Medicine)

9:20 ~ 9:40

L3-2 天然変性蛋白質の段階的なNMR解析

Features of intrinsically disordered proteins monitored by NMR

大野 悠一¹, 宮下 真奈美¹, 大野 優美¹, 岡崎 萌花¹, 渡部 暁², 枋尾 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 生命システム研究センター)

9:40 ~ 10:00

L3-3 「汎特異的」相互作用を基盤とする多剤耐性転写制御因子の機能発現機構

Entropy-driven dynamic multidrug recognition by multidrug transcriptional repressor

○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)

10:00 ~ 11:00 座長：大久保 忠恭

10:00 ~ 10:20

L3-4 ケモカイン受容体－細胞内制御因子フロント間相互作用の構造生物学的解析

Structural analyses of the interaction between the chemokine receptor and the cytosolic regulator FROUNT

○吉永 壮佐¹, 江崎 芳¹, 辻辰 一郎¹, 遠田 悦子², 寺島 裕也², 齊藤 貴士³, 神田 大輔³, 河野 俊之⁴, 大澤 匡範⁵, 上田 卓見⁵, 嶋田 一夫⁵, 松島 綱治², 寺沢 宏明¹ (¹熊本大学大学院 生命科学研究部, ²東京大学大学院 医学系研究科, ³九州大学 生体防御医学研究所, ⁴北里大学 医学部, ⁵東京大学大学院 薬学系研究科)

10:20 ~ 10:40

L3-5 NMRとSAXSによるマルチドメインタンパク質の構造解析

NMR and SAXS studies on multi-domain protein

小林 彩保, 金場 哲平, 伊藤 隆, ○三島 正規 (首都大学東京大学院 理工学研究科)

10:40 ~ 11:00

L3-6 酵素活性部位水素結合ネットワーク中にあるHisの“tug-of-war”(綱引き)による構造安定性変化

The structural stability of the catalytic site of human Pin1 is mediated by the balance of the “tug-of-war” in the hydrogen bond network

○枋尾 尚哉¹, 徐 宁², 玉利 佑², 津田 亮祐², 楯 真一^{1,2} (¹広島大学 核内クロマチン・ライブダイナミクスの数理研究拠点, ²広島大学大学院 理学研究科)

公募型シンポジウム3 [会場：会議室2 / Conference Room 2]

9:00 ~ 11:00

NMRとプリオン
NMR and Prion

座長：桑田 一夫

9:00 ~ 9:10

SL3-1 キネティック NMR によるタンパク質の‘かたち’の進化の観測
Evolution of protein conformation observed by the ‘Kinetic NMR’

○桑田 一夫^{1,2}, 山口 圭一¹ (1岐阜大学大学院 連合創薬医療情報研究科, 2岐阜大学大学院 医学系研究科)

9:10 ~ 9:35

SL3-2 プリオン蛋白質のモルテングロビュール状態の発見とオリゴマー形成との関連
Identification of the molten globule state of prion protein and its relevance to β -rich oligomer conversion

○本田 諒¹, 山口 圭一², 桑田 一夫^{1,2,3} (1岐阜大学 医学部医学科, 2岐阜大学大学院 連合創薬医療情報研究科, 3岐阜大学大学院 医学系研究科 遺伝発生学分野)

9:35 ~ 10:00

SL3-3 Sup35天然変性領域のアミロイド構造多形形成機構の解明
Local compact structure in an intrinsically disordered protein Sup35-NM determines amyloid conformation

○大橋 祐美子^{1,2}, 山口 芳樹³, 鎌足 雄司⁴, 花鳥 慎弥³, 桑田 一夫⁴, 田中 元雅² (1東京理科大学 理学部, 2理化学研究所 脳科学総合研究センター, 3理化学研究所 糖鎖構造生物学研究チーム, 4岐阜大学 連合創薬医療情報研究科)

10:00 ~ 10:25

SL3-4 カルボニル炭素-カルボニル炭素 ($^3J_{CC}$) 相関 NMR の利用による変性蛋白質の主鎖信号帰属
Application of carbonyl-carbonyl correlation NMR experiments with ultra-high resolution for resonance assignments of disordered proteins

○吉村 優一^{1,2}, Natalia Kulminskaya^{1,2}, Frans Mulder^{1,2} (1Interdisciplinary Nanoscience Center, Aarhus University, Denmark, 2Department of Chemistry, Aarhus University, Denmark)

10:25 ~ 10:50

SL3-5 固体 NMR と TEM によるヒトカルシトニンにおけるアミロイド線維形成と阻害機構の解明
Amyloid fibril formation and inhibition mechanism of human calcitonin as studied by solid state NMR and TEM

○内藤 晶¹, 伊藤(渡邊) ひかり¹, 上平(石島) 美弥², Namsrai Javkhlantugs¹, 近藤 正志³, 中越 雅道³, 川村 出¹, 辻 暁², 斉藤 肇², 上田 一義¹ (1横浜国立大学大学院 工学府, 2兵庫県立大学理学部大学院, 3横浜国立大学 機器分析評価センター)

10:50 ~ 11:00 コメント 後藤 祐児

一般講演5 [会場：MOホール：English lecture]

11:10 ~ 12:10 座長 小林 直宏

11:10 ~ 11:30

L3-7 分子混雑環境に適用可能な新規拡張 model-free 解析法の開発

Development of an extended model-free analysis for macromolecular crowding environment

○岡村 英保¹, 柄尾 尚哉², 杉山 修世^{1,2}, 渡部 暁^{1,2}, 優 乙石³, フェイグ マイケル^{1,4}, 杉田 有治^{1,3,5}, 木川 隆則^{1,2,6} (¹理化学研究所 生命システム研究センター, ²理化学研究所 生命分子システム基盤研究領域, ³理化学研究所 杉田理論分子科学研究室, ⁴ミシガン州立大学, ⁵理化学研究所計算科学研究機構, ⁶理化学研究所 イノベーション推進センター)

11:30 ~ 11:50

L3-8 分子量 (横緩和時間) の差に由来する物質定量のゆがみを克服する新しい測定法の開発

Development of new methods to compensate distortion of quantitation caused by difference in molecular weight (transverse relaxation time)

岡村 英保^{1,2}, 西村 裕志^{3,4}, 永田 崇¹, 木川 隆則², 渡辺 隆司^{3,4}, ○片平 正人^{1,4} (¹京都大学 エネルギー理工学研究所, ²理化学研究所 生命システム研究センター, ³京都大学 生存圏研究所, ⁴科学技術振興機構 CREST)

11:50 ~ 12:10

L3-9 Theoretical calculation of ¹H/¹³C NMR shifts indicative of salt bridge between methylated Lys and CO₂ group of Asp or Glu residues in proteins

Jakub Šebera¹, Yoshikazu Hattori², Yoshiyuki, Tanaka³, Chojiro Kojima², and ○Vladimír Sychrovský¹ (¹Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, ²Institute of Protein Research, Osaka University, ³Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Tohoku University)

12:20 ~ 13:10 昼食/Lunch

ランチョンセミナー /Luncheon Seminar [会場：MOホール]

< NMR 共用プラットフォーム >

NMR 研究の先端的基盤を提供する NMR 共用プラットフォームと理研 NMR 施設の紹介
木川 隆則 (理化学研究所)

横浜市大の NMR 施設共用の紹介：950 MHz LC-NMR と 900 MHz 固体 NMR
西村 善文 (横浜市立大学大学院生命医科学研究科)

大阪大学蛋白質研究所 NMR 施設における共用取組と研究支援
児嶋 長次郎 (大阪大学蛋白質研究所)

13:10 ~ 14:40 ポスターセッション (奇数番号)
Poster Session (odd numbers)

一般講演6 [会場：会議室2]

14:50 ~ 15:30 座長：山本 泰彦

14:50 ~ 15:10

L3-10 ¹³C selective HMBC 法による糖鎖の立体構造とダイナミクスに関する研究

Study on 3D structure and dynamics of glycans using ¹³C selective HMBC

○鶴澤 洵, 加藤 雅樹, 関 宏子, 榊 飛雄真, 山口 芳樹 (理化学研究所 糖鎖構造生物学研究チーム, 千葉大学 共用機器センター)

15:10 ~ 15:30

L3-11 $^{15}\text{N}/^{199}\text{Hg}$ NMR分光法による水銀を介したチミン-チミン塩基対の構造決定
および電子状態解析

Structure determination and electronic structure of Hg^{II} -mediated T-T base-pair in DNA duplex with $^{15}\text{N}/^{199}\text{Hg}$ NMR spectroscopy

○田中 好幸¹, 大樂 武範¹, 古板 恭子², 岡本 到^{3,4}, 小野 晶³, 鳥越 秀峰⁵, Vladimir Sychrovsky⁶, 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, ³神奈川県 工学部, ⁴理化学研究所, ⁵東京理科大学 理学部, ⁶チェコ科学アカデミー)

15:30 ~ 16:10 座長：水野 元博

15:30 ~ 15:50

L3-12 変性シリカ-水共存系における水の核磁気緩和現象

Magnetic relaxation of water protons in fumed silica/water coexisting system

○牧 秀志¹, 十川 廉¹, 村上 良², 山本 雅博², 水畑 穰¹ (¹神戸大学大学院 工学研究科, ²甲南大学 理工学部)

15:50 ~ 16:10

L3-13 第一原理分子動力学計算とGIPAW法を併用したリチウムホウ酸ガラスの
NMRパラメータの推定

NMR parameter estimation of lithium borate glass by combining ab initio molecular dynamics and GIPAW calculation

○大窪 貴洋¹, 岩館 泰彦¹, 土田 英二² (¹千葉大学大学院 工学研究科, ²産業技術総合研究所)

公募型シンポジウム4 [会場：MOホール／MO Hall]

14:50 ~ 16:50

NMRの強みを生かした生体系への応用
NMR applications to biological systems

座長：嶋田 一夫, 伊倉 光彦

14:50 ~ 15:14

SL3-6 タンパク質の高エネルギー状態を標的とした構造生物学

High-energy conformations of proteins as a new target of structural biology

○北原 亮, 北沢 創一郎 (立命館大学 薬学部薬学科)

15:14 ~ 15:38

SL3-7 チロシンキナーゼのNMR解析へ向けた試み：受容体型チロシンキナーゼの活性化機構

Development of the method for production of the isotope labeled tyrosine kinase, and its application to NMR analysis of the interaction between kinase domains required for activation of the receptor tyrosine kinase

○小橋川 敬博^{1,2}, 稲垣 冬彦² (¹熊本大学大学院 生命科学研究部, ²北海道大学大学院 先端生命科学研究院)

15:38 ~ 16:02

SL3-8 SAIL法を利用したタンパク質構造揺らぎのNMR研究

NMR study on protein dynamics by the SAIL method

○武田 光広¹, 甲斐荘 正恒^{1,2} (¹名古屋大学理学研究科 構造生物学研究センター, ²首都大学 東京 理学系研究科)

16:02 ~ 16:26

SL3-9 生細胞内の生命現象を観測する in-cell NMR法の開発と応用
A bioreactor for NMR observation of biological events inside living cells
○西田 紀貴, 嶋田 一夫 (東京大学大学院 薬学系研究科)

16:26 ~ 16:50

SL3-10 Dissecting oncogenic RAS signaling by NMR
Smith Mathew J., Mazhab-Jafari Mohammad, Feng Zhenhao, Marshall Christopher B., ○伊倉
光彦 (Princess Margaret Cancer Centre, University of Toronto)

16:50 ~ 17:00

閉会の挨拶 藤原 敏道 (第53回NMR討論会世話人代表)
Closing Remarks: Toshimichi Fujiwara (Organizer of the 53rd Annual Meeting of the Nuclear
Magnetic Resonance Society of Japan)