

# 第57回 NMR 討論会 (2018)

The 57<sup>th</sup> Annual Meeting of the Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan (2018)

会期：2018年 9月18(火)～9月20(木)  
September 18 (Tue) - 20 (Thu)

会場：札幌コンベンションセンター  
Sapporo Convention Center  
〒003-0006 北海道札幌市白石区東札幌6条1丁目1-1

## 第1日目 9月18日(火) / Day 1 (Sep. 18, Tue)

### 一般演題 1 [会場：大ホール A・B]

9:30～10:50 座長：齊尾 智英

9:30～9:50

#### L1-1 NMR による抗菌ペプチド nukacin ISK-1 の溶液構造決定と熱力学的解析

○藤浪大輔<sup>1</sup>, Mahin Abdullah-Al<sup>2</sup>, M Elsayed Khaled<sup>2</sup>, 永尾潤一<sup>3</sup>, 善藤威史<sup>2</sup>, 園元賢二<sup>2</sup>, 神田大輔<sup>1</sup> (<sup>1</sup>九州大学・生体防御医学研究所, <sup>2</sup>九州大学・農学研究院, <sup>3</sup>福岡歯科大学・機能生物化学講座)

9:50～10:10

#### L1-2 <sup>15</sup>N 直接検出 NMR 法による高分子量バイオ医薬の非侵襲的観測

○徳永裕二<sup>1,2</sup>, 竹内恒<sup>1</sup>, 鳥澤拓也<sup>3</sup>, 奥出順也<sup>3</sup>, 嶋田一夫<sup>1,4</sup> (<sup>1</sup>国立研究開発法人 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, <sup>2</sup>一般社団法人 バイオ産業情報化コンソーシアム, <sup>3</sup>中外製薬株式会社, <sup>4</sup>東京大学大学院 薬学系研究科)

10:10～10:30

#### L1-3 G タンパク質共役型内向き整流性カリウムチャネルのエタノール依存的な活性化機構の解明

○外山侑樹<sup>1,2</sup>, 加納花穂<sup>1</sup>, 間瀬瑠子<sup>1</sup>, 横川真梨子<sup>1</sup>, 大澤匡範<sup>1</sup>, 嶋田一夫<sup>1</sup> (<sup>1</sup>東京大学大学院薬学系研究科, <sup>2</sup>日本バイオ産業情報化コンソーシアム)

10:30～10:50

#### L1-4 NMR と人工細胞膜を用いた不凍タンパク質の分子機能解析

渡辺爽<sup>1</sup>, 新井達也<sup>1</sup>, 三浦愛<sup>2</sup>, 久米田博之<sup>3</sup>, ○津田栄<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>北海道大学大学院生命科学院・生命融合科学コース・分子適応科学研究室, <sup>2</sup>産業技術総合研究所・生物プロセス研究部門・AFP 特別研究チーム, <sup>3</sup>北海道大学先端生命科学院・国際連携研究教育局・グローバルステーション)

10:50～11:00 休憩

### 一般演題 2 [会場：大ホール A・B]

11:00～12:00 座長：伊藤 隆

11:00～11:20

#### L1-5 ケモカイン受容体—細胞内制御因子フロント間相互作用を標的とするユニークな作用機序をもつ抗がん剤候補化合物の NMR 解析

○吉永壮佐<sup>1</sup>, 辻辰一郎<sup>1</sup>, 石田規人<sup>1</sup>, 柚木芳<sup>1</sup>, 武田光広<sup>1</sup>, 寺島裕也<sup>2,3</sup>, 遠田悦子<sup>2,3</sup>, 松島綱治<sup>2,3</sup>, 寺沢宏明<sup>1</sup> (<sup>1</sup>熊本大学大学院 生命科学研究部, <sup>2</sup>東京大学大学院 医学系研究科, <sup>3</sup>東京理科大学 生命医科学研究所)

11:20~11:40

L1-6 構造蛋白質である HIV-1p17 と p24 の動的と静的構造の NMR 解析

○西村千秋(帝京平成大学薬学部)

11:40~12:00

L1-7 禁制コヒーレント遷移を用いたリガンドの動的構造最適化

○竹内恒<sup>1</sup>, 水越弓子<sup>1,2</sup>, 徳永裕二<sup>1</sup>, 滝沢剛<sup>3</sup>, 半沢宏之<sup>3</sup>, 嶋田一夫<sup>4</sup> (<sup>1</sup>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, <sup>2</sup>バイオ産業情報化コンソーシアム, <sup>3</sup>第一三共RDノバーレ株式会社, <sup>4</sup>東京大学大学院薬学系研究科)

12:00~12:30 Meeting of NMRSJ 総会

12:30~13:30 Lunch

ポスターセッション [会場：大ホール C]

13:30~15:00	ポスターセッション I (偶数番号、若手ポスター賞審査含む) Poster Session I (even numbers) including poster presentations for Young Scientists Poster Awards
-------------	--

一般演題 3 [会場：大ホール A・B]

15:00~16:40 座長：川村 出

15:00~15:20

L1-8 セメント硬化体へのプロトン NMR 測定の実用

○胡桃澤清文(北海道大学大学院工学研究院)

15:20~15:40

L1-9 磁場配向を利用した微結晶粉末からの異方的相互作用の解析：擬単結晶から磁場配向懸濁体へ

○久住亮介<sup>1</sup>, 門間啓<sup>1</sup>, 和田昌久<sup>1</sup>, 木村恒久<sup>1</sup>, 武田和行<sup>2</sup> (<sup>1</sup>京都大学大学院 農学研究科, <sup>2</sup>京都大学大学院 理学研究科)

15:40~16:00

L1-10 <sup>7</sup>Li NMR によるニッケルマンガン系正極の試料組成およびサイクル劣化挙動評価

○矢澤宏次<sup>1</sup>, 田淵光春<sup>2</sup> (<sup>1</sup>(株)JEOL RESONANCE, <sup>2</sup>産業技術総合研究所)

16:00~16:20

L1-11 N ドープにより複合アニオン化した Li<sub>2</sub>S-P<sub>2</sub>S<sub>5</sub> 電解質の固体高分解能 NMR

○野田泰斗<sup>1</sup>, 高倉希<sup>1</sup>, 木村拓哉<sup>2</sup>, 林晃敏<sup>2</sup>, 辰巳砂昌弘<sup>2</sup>, 竹腰清乃理<sup>1</sup> (<sup>1</sup>京都大学大学院理学研究科, <sup>2</sup>大阪府立大学工学研究科)

16:20~16:40

L1-12 ラミネート Li 固体電池のオペランド NMR/MRI 観察

○拝師智之<sup>1</sup>, 藤木聡<sup>2</sup>, 村上雄斗<sup>3</sup>, 寺田康彦<sup>4</sup>, 相原雄一<sup>2</sup> (<sup>1</sup>株式会社エム・アール・テクノロジー, <sup>2</sup>株式会社サムスン日本研究所, <sup>3</sup>筑波大学理工学群応用理工学類応用物理専攻, <sup>4</sup>筑波大学数理物質系物理工学域)

16:40~16:50 休憩

## 一般演題 4 [会場：大ホール A・B]

16:50～18:10 座長：西山 祐介

16:50～17:10

### L1-13 スピンロックパルスを用いない縦磁化間 CPMAS のすすめ

○神原孝之<sup>1,2,3</sup>, 竹腰清乃理<sup>2</sup> (<sup>1</sup>東京工業大学 生命理工学院, <sup>2</sup>京都大学大学院 理学研究科, <sup>3</sup>理化学研究所 放射光科学研究センター NMR 研究開発部門)

17:10～17:30

### L1-14 ENDOR 共振器を用いた希釈冷凍機中での動的核偏極

○香川晃徳<sup>1</sup>, 根来誠<sup>1,2</sup>, 椿山大誠<sup>1</sup>, 小林太郎<sup>1</sup>, 北川勝浩<sup>1</sup> (<sup>1</sup>大阪大学大学院 基礎工学研究科, <sup>2</sup>JST さきがけ)

17:30～17:50

### L1-15 自作改良型 NMR 装置を用いた NMR スペクトルによる半導体中のドーパント位置の特定

○佐々木進<sup>1</sup>, 坂井祐大<sup>2</sup>, 池田宏輔<sup>2</sup> (<sup>1</sup>新潟大学工学部, <sup>2</sup>新潟大学自然科学研究科)

17:50～18:10

### L1-16 高温超伝導バルク磁石での新規シムコイル検討

○仲村高志<sup>1</sup>, 内海博明<sup>2</sup>, 伊藤佳孝<sup>3</sup>, 柳陽介<sup>3</sup>, 野村師子<sup>3</sup> (<sup>1</sup>理化学研究所 放射光科学研究センター NMR 研究開発部門, <sup>2</sup>JEOL RESONANCE, <sup>3</sup>イムラ材料開発研究所)

18:30～20:00 Council, Executive Committee 評議会、理事会

**Lecture Session 5 [Main Hall]**

9:30~10:30 Chairperson : Takanori Kigawa

9:30~9:50

**L2-1 Structure-function investigation of deoxyribozymes composed of heme and G-quadruplex DNAs**

○ Yasuhiko Yamamoto<sup>1,2,3</sup>, Haruka Araki<sup>1</sup>, Kosuke Hayasaka<sup>1</sup>, Ryosuke Shinomiya<sup>1</sup>, Yusaku Nakayama<sup>1</sup>, Kentaro Ochi<sup>1</sup>, Tomokazu Shibata<sup>1</sup>, Atsuya Momotake<sup>1</sup>, Masaki Hagihara<sup>4</sup>, Dipankar Sen<sup>5</sup>, Hikaru Hemmi<sup>6</sup> (<sup>1</sup>Department of Chemistry, University of Tsukuba, Tsukuba 305-8571, Japan, <sup>2</sup>Tsukuba Research Center for Energy Materials Science (TREMS), University of Tsukuba, Tsukuba 305-8571, Japan, <sup>3</sup>Life Science Center for Survival Dynamics, Tsukuba Advanced Research Alliance (TARA), University of Tsukuba, Tsukuba 305-8577, Japan, <sup>4</sup>Graduate School of Science and Technology, Hirosaki University, Hirosaki 036-8560, Japan, <sup>5</sup>Department of Chemistry, Simon Fraser University, Burnaby, British Columbia V5A 1S6, Canada, <sup>6</sup>Food Research Institute, NARO, Tsukuba 305-8642, Japan)

9:50~10:10

**L2-2 NMR approaches for revealing structure and dynamics of intrinsically disordered proteins (IDPs)**

○ Shin-ichi Tate<sup>1,4</sup>, Ryosuke Kawasaki<sup>1</sup>, Ryohei Inoue<sup>1</sup>, Cloud Lee<sup>2</sup>, Naoya Tochio<sup>1</sup>, Danny Hsu<sup>2</sup>, Jie-Rong Huang<sup>3</sup> (<sup>1</sup>Dept. Mathematical and Life Sciences, Hiroshima Univ., Japan, <sup>2</sup>Academia Sinica, Taiwan, <sup>3</sup>National Yang-Ming Univ., Taiwan, <sup>4</sup>RcMcD, Hiroshima Univ., Japan)

10:10~10:30

**L2-3 Functional roles of Mg<sup>2+</sup> binding sites in ion-dependent gating of a Mg<sup>2+</sup> channel, MgtE, revealed by solution NMR**

Tatsuro Maruyama<sup>1</sup>, Shunsuke Imai<sup>1</sup>, Tsukasa Kusakizako<sup>2</sup>, Motoyuki Hattori<sup>3</sup>, Ryuichiro Ishitani<sup>2</sup>, Osamu Nureki<sup>2</sup>, Koichi Ito<sup>4</sup>, Andrés D. Maturana<sup>5</sup>, Ichio Shimada<sup>1</sup>, ○ Masanori Osawa<sup>1,6</sup> (<sup>1</sup>Graduate School of Pharmaceutical Sciences, The University of Tokyo, Japan, <sup>2</sup>Graduate School of Science, The University of Tokyo, Japan, <sup>3</sup>School of Life Sciences, Fudan University, China, <sup>4</sup>Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, Japan, <sup>5</sup>Graduate School of Bioagricultural Sciences, Nagoya University, Japan, <sup>6</sup>Faculty of Pharmacy, Keio University)

10:30~10:50 Break

**Lecture Session 6 [Main Hall]**

10:50~11:50 Chairperson : Chojiro Kojima

10:50~11:10

**L2-4 Conformational variation in membrane-associated H-Ras elucidated by in-cell <sup>19</sup>F-NMR spectroscopy**

○ Hiromasa Yagi, Masaomi Ikari, Takanori Kigawa (RIKEN Center for Biosystems Dynamics Research)

11:10~11:30

**L2-5 E22G Pathogenic Mutation of  $\beta$ -amyloid (A $\beta$ ) Enhances Misfolding of A $\beta$ 40 by Unexpected Prion-like Cross Talk between A $\beta$ 42 and A $\beta$ 40**

○ Yoshitaka Ishii<sup>1,2</sup>, Yiling Xiao<sup>2</sup>, Brian Yoo<sup>2</sup>, Isamu Matsuda<sup>1</sup>, Dan McElheny<sup>2</sup> (<sup>1</sup>School of Life Science and Technology, Tokyo Institute of Technology, <sup>2</sup>Department of Chemistry, University of Illinois at Chicago)

11:30~11:50

**L2-6 Super-fast collection of  $^1\text{H}$ -detected SSNMR data under ultra-fast MAS for proteins in nano-mole scale**

○ Ayesha Wickramasinghe<sup>1,2</sup>, Yoshitaka Ishii<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>Department of Life Science, Tokyo Institute of Technology, <sup>2</sup>NMR Science and Development Division, RIKEN Yokohama Campus)

11:50~13:30 Lunch

**Lecture Session 7 [Main Hall]**

13:30~14:10 Chairperson : Kazuyuki Takeda

13:30~13:50

**L2-7 DNP at 16.4 T and 30 K for Mesoscopic Molecular Domain Selection**

○ Yoh Matsuki<sup>1</sup>, Toshitaka Idehara<sup>2</sup>, Yuki Endo<sup>3</sup>, Takahiro Nemoto<sup>3</sup>, Shigeo Fukui<sup>4</sup>, Jagadishwar Sirigiri<sup>5</sup>, Hiroto Suematsu<sup>3</sup>, Toshimichi Fujiwara<sup>1</sup> (<sup>1</sup>Institute for Protein Research, Osaka University, Japan, <sup>2</sup>Research Center for Development of Far-Infrared Region, University of Fukui, Japan, <sup>3</sup>JEOL RESONANCE Inc., Japan, <sup>4</sup>Cryovac Corp., Japan, <sup>5</sup>Bridge12 Technologies Inc., MA, USA)

13:50~14:10

**L2-8 Understanding Hydrogen bonding structure by electron and NMR nano-crystallography**

Maria Candelaria Guzman Afonso<sup>1</sup>, You-lee Hong<sup>1</sup>, Henri Colaux<sup>1</sup>, Hirofumi Iijima<sup>2</sup>, Akihiro Saitow<sup>2</sup>, Takuma Fukumura<sup>2</sup>, Yoshitaka Aoyama<sup>2</sup>, Souhei Motoki<sup>2</sup>, Tetsuo Oikawa<sup>3</sup>, Toshio Yamazaki<sup>4</sup>, Daisuke Hashizume<sup>5</sup>, Koji Yonekura<sup>6</sup>, ○ Yusuke Nishiyama<sup>1,7</sup> (<sup>1</sup>RIKEN-JEOL Collaboration Center, Kanagawa, Japan, <sup>2</sup>JEOL Ltd., Tokyo, Japan, <sup>3</sup>JEOL ASIA Pte. Ltd, Singapore, <sup>4</sup>RIKEN SPring-8 Center, Kanagawa, Japan, <sup>5</sup>RIKEN Center for Emergent Matter Science (CEMS), Saitama, Japan, <sup>6</sup>RIKEN SPring-8 Center, Hyogo, Japan, <sup>7</sup>JEOL RESONANCE Inc., Tokyo, Japan)

**Lecture Session 8 [Main Hall]**

14:30~15:10 Chairperson : Takahisa Ikegami

14:30~14:50

**L2-9 Investigation of Long-range Heteronuclear J couplings in Esters: Implications for  $^{13}\text{C}$  Metabolic MRI by Side-Arm Parahydrogen-Induced Polarization**

○ Neil James Stewart<sup>1</sup>, Hiroyuki Kumeta<sup>2</sup>, Mitsushi Tomohiro<sup>1</sup>, Takuya Hashimoto<sup>3</sup>, Noriyuki Hatae<sup>4</sup>, Shingo Matsumoto<sup>1</sup> (<sup>1</sup>Division of Bioengineering and Bioinformatics, Graduate School of Information Science and Technology, Hokkaido University, <sup>2</sup>Department of Structural Biology, Faculty of Advanced Life Science, Hokkaido University, Global Station for Soft Matter, Global Institution for Collaborative Research and Education, Hokkaido University, <sup>3</sup>Department of Chemistry, Graduate School of Science, Kyoto University, Department of Chemistry, Graduate School of Science, Chiba University, <sup>4</sup>School of Pharmaceutical Sciences, Health Sciences University of Hokkaido)

14:50~15:10

**L2-10 Accounts of NMR signal reception based on Heisenberg-Langevin formalism**

○ Kazuyuki Takeda<sup>1</sup>, Koji Usami<sup>2</sup> (<sup>1</sup>Graduate School of Science, Kyoto University, <sup>2</sup>Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo)

### Invited Lecture [Main Hall]

15:20~16:30 Chairperson : Shinichi Tate

15:20~15:55

**IL1** Quantitative and Qualitative proton-proton distances in fully protonated solids at fast magic spinning NMR

○ Vipin Agarwal (Tata Institute of Fundamental Research, India)

15:55~16:30

**IL2** Protein conformational exchange in talin probed by high pressure NMR

○ M. P. Williamson (University of Sheffield, UK)

### Invited Lecture [Main Hall]

16:50~17:25 Chairperson : Sakae Tsuda

16:50~17:25

**IL3** Targeting KRAS Oncoprotein on Biological Membranes

○ Mitsuhiro Ikura (University of Toronto, Canada)

## 第3日目 9月20日(木) / Day 3 (Sep. 20, Thu)

### 一般演題 9 [会場：大ホール A・B]

9:00~10:20 座長：山本 泰彦

9:00~9:20

**L3-1**  $\text{TiF}_4$  の巨大  $^{19}\text{F}$  CSA; NMR と DFT 計算による評価

○村上美和<sup>1</sup>, 野田泰斗<sup>2</sup>, 竹腰清乃理<sup>2</sup> (<sup>1</sup>京都大学 産官学連携本部, <sup>2</sup>京都大学大学院 理学研究科 化学)

9:20~9:40

**L3-2** プロトン伝導経路とゲスト分子吸着サイトを両立する配位高分子の合成と構造解析

○犬飼宗弘<sup>1</sup>, 堀毛悟史<sup>2</sup>, 西山裕介<sup>3</sup> (<sup>1</sup>徳島大学大学院社会産業理工学研究部, <sup>2</sup>京都大学 高等研究院 物質-細胞統合システム拠点, <sup>3</sup>理化学研究所 CLST-JEOL 連携センター)

9:40~10:00

**L3-3** パルス磁場勾配 NMR と緩和時間測定による高分子電解質膜中の水拡散挙動の解析 (I) 湿度依存性

○倉橋直也<sup>1</sup>, 小具健一<sup>2</sup>, 陸川政弘<sup>1</sup> (<sup>1</sup>上智大学理工学部 物質生命理工学科, <sup>2</sup>技術研究組合 FC-Cubic)

10:00~10:20

**L3-4**  $^1\text{H}$  NMR 緩和時間測定：水分子内包フラーレンを配位子とする 9 族金属錯体の構造特性評価

○橋川祥史, 川崎皓斗, 村田靖次郎 (京都大学化学研究所)

### ポスターセッション [会場：大ホール C]

10:40~12:10 ポスターセッション II (奇数番号)

Poster Session II (odd numbers)

12:10~13:10 Lunch

### 一般演題 10 [会場：大ホール A・B]

13:10~14:30 座長：片平 正人

13:10~13:30

**L3-5** 長い  $T_1$  を持つ分子の高感度溶液 NMR 測定法の開発

○古板恭子<sup>1</sup>, 服部良一<sup>1,2</sup>, 池上貴久<sup>1,3</sup>, 藤原敏道<sup>1</sup>, 児嶋長次郎<sup>1,4</sup> (<sup>1</sup>大阪大学 蛋白質研究所, <sup>2</sup>徳島文理大学 薬学部, <sup>3</sup>横浜市立大学 生命医科学研究科, <sup>4</sup>横浜国立大学 大学院工学研究院)

13:30~13:50

**L3-6** 溶液 NMR における生体高分子の核超偏極技術の開発

○大木出<sup>1</sup>, 藤咲貴大<sup>2</sup>, 池上貴久<sup>3</sup>, 白川昌宏<sup>2</sup>, 水落憲和<sup>1</sup> (<sup>1</sup>京都大学 化学研究所, <sup>2</sup>京都大学 工学研究科, <sup>3</sup>横浜市立大学 生命医科学研究科)

13:50~14:10

**L3-7** 従来型シグナル帰属によらず時間軸データを直接解析するタンパク質 NMR 解析

○葛西卓磨<sup>1,2</sup>, 小野峻佑<sup>2,3</sup>, 田中利幸<sup>4</sup>, 池田思朗<sup>5</sup>, 木川隆則<sup>1,6</sup> (<sup>1</sup>理化学研究所 生命機能科学研究センター, <sup>2</sup>科学技術振興機構 さきがけ, <sup>3</sup>東京工業大学 科学技術創成研究院, <sup>4</sup>京都大学大学院 情報学研究科, <sup>5</sup>統計数理研究所 数理・推論研究系, <sup>6</sup>東京工業大学 情報理工学院)

14:10~14:30

**L3-8** In-cell NMR 法を用いたヒト生細胞内の DNA および RNA の構造とダイナミクスの解析  
○山置佑大<sup>1</sup>, 永田崇<sup>1,2</sup>, 清石彩華<sup>2</sup>, 三宅雅之<sup>2</sup>, 加納ふみ<sup>3</sup>, 村田昌之<sup>4</sup>, 片平正人<sup>1,2</sup> (1 京都大学 エネルギー理工学研究所, 2 京都大学大学院 エネルギー科学研究科, 3 東京工業大学大学院 科学技術創成研究院, 4 東京大学大学院 総合文化研究科)

## 一般演題 11 [会場：大ホール A・B]

14:40~16:00 座長：石井 佳誉

14:40~15:00

**L3-9** 常磁性プローブを利用したマルチドメインタンパク質のアンサンブル構造解析  
○斉尾智英<sup>1,2</sup>, 瀧下俊平<sup>2</sup>, 平松蒼野<sup>2</sup>, 浅田瑞枝<sup>3</sup>, 中村敏和<sup>3</sup>, 石森浩一郎<sup>1,2</sup> (1 北海道大学 大学院理学研究院, 2 北海道大学 大学院総合化学院, 3 自然科学研究機構 分子科学研究所)

15:00~15:20

**L3-10** レオロジー NMR によるアミロイド形成時のタンパク質構造変化の追跡  
○森本大智<sup>1</sup>, Erik Walinda<sup>2</sup>, 島田陽介<sup>1</sup>, 岩川直都<sup>1</sup>, Ulrich Scheler<sup>3</sup>, 山本昭彦<sup>4</sup>, 白川昌宏<sup>1</sup>, 菅瀬謙治<sup>1</sup> (1 京都大学大学院工学研究科分子工学専攻, 2 京都大学大学院 医学研究科, 3 Leibniz Institute of Polymer Research Dresden, 4 ブルカー・バイオスピン株式会社)

15:20~15:40

**L3-11** 血清中での抗体間の相互作用解析  
○谷中冴子<sup>1,2</sup>, 山崎俊夫<sup>3</sup>, 奥語理那<sup>1,2</sup>, 矢木宏和<sup>2</sup>, 加藤晃一<sup>1,2</sup> (1 自然科学研究機構 生命創成探究センター / 分子科学研究所, 2 名古屋市立大学大学院薬学研究科, 3 理化学研究所 放射光科学研究センター)

15:40~16:00

**L3-12** クモ牽引糸の高強度・高弾性の起源と固体 NMR 構造解析  
○朝倉哲郎, 松田裕生, 田制侑悟, 西村明生, 片岡奈緒美, 今井亜希子 (東京農工大学大学院 工学研究科)