

# 第49回 NMR 討論会

The 49th Annual Meeting of the Nuclear Magnetic Resonance Society of Japan

会 期 : 2010年11月15日(月), 16日(火), 17日(水)  
November 15 (Mon.) – 17 (Wed.), 2010

会 場 : タワーホール船堀  
Tower Hall Funabori  
〒134-0091 東京都江戸川区船堀 4-1-1, Tel: 03-5676-2211

共 催 : 新学術領域研究「過渡的複合体が関わる生命現象の統合的理解」

## 第1日目 11月15日(月) / Day 1 (Nov. 15, Mon.) 日本語セッション / Japanese session

9:25~9:30

開会の挨拶

日本核磁気共鳴学会会長

9:30~10:45

座長 児嶋 長次郎

- L1 過渡的に形成される立体構造の常磁性緩和効果による解析  
Structural studies of transient structures using PRE  
○三島 正規<sup>1</sup>, 金場 哲平<sup>1</sup>, 伊藤 隆<sup>1</sup>, 箱嶋 敏雄<sup>2</sup>, 三神 すずか<sup>1</sup> (<sup>1</sup>首都大理工, <sup>2</sup>奈良先端情報)
- L2 45 kDa プロテインキナーゼ VRK1 の NMR 構造解析  
NMR structural analysis of 45 kDa protein kinase, VRK1  
○栃尾 尚哉<sup>1</sup>, 小柴 生造<sup>1,2</sup>, 横山 順<sup>3</sup>, 横山 茂之<sup>1,4</sup>, Ho Sup Yoon<sup>5</sup>, 木川 隆則<sup>1,6</sup> (<sup>1</sup>理研生命分子システム基盤, <sup>2</sup>横浜市大・院生命ナノシステム, <sup>3</sup>太陽日酸株式会社, <sup>4</sup>東大・院理, <sup>5</sup>ナンヤン工科大 SBS, <sup>6</sup>東工大・院総理工)
- L3 Deuterium-decoupled 3D HCA(N)CO に支援された重水溶媒中におけるタンパク質の立体構造解析  
Structure determination of proteins in <sup>2</sup>H<sub>2</sub>O solution aided by a deuterium-decoupled 3D HCA(N)CO experiment  
○小椋 賢治, 久米田 博之, 稲垣 冬彦 (北大先端生命)

10:45~11:35

座長 神田 大輔

- L4 蛋白質側鎖 OH/SH の水素交換速度の解析  
NMR Hydrogen exchange study of side-chain OH/SH groups in proteins  
○武田 光広<sup>1</sup>, Chun-Jiun Yang<sup>2</sup>, JunGoo Jee<sup>2</sup>, 小野 明<sup>3</sup>, 寺内 勉<sup>3</sup>, 甲斐荘 正恒<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>名大理, <sup>2</sup>首都大, <sup>3</sup>SAIL テクノロジーズ)
- L5 高圧力 NMR 法による Lys48 結合型ジユビキチンの構造揺らぎ  
High-pressure NMR characterizes conformational fluctuation of Lys48-linked diubiquitin  
○北原 亮<sup>1</sup>, 平野 貴志<sup>2</sup>, 矢木 真穂<sup>2,3</sup>, 秦 和澄<sup>1</sup>, 赤坂 一之<sup>4</sup>, 加藤 晃一<sup>2,3</sup> (<sup>1</sup>立命大薬, <sup>2</sup>名市大院薬, <sup>3</sup>岡崎統合バイオ, <sup>4</sup>近大高圧研)

11:35~12:05

日本核磁気共鳴学会総会

Meeting of the NMR Society of Japan

12:05~13:05 昼食 / Lunch

13:05~14:35

ポスターセッション (偶数番号)

Poster Session (even numbers)

若手ポスター賞ポスター発表審査

Poster presentations for Young Scientists Poster Awards

---

14:35~18:00

若手ポスター賞口頭発表審査

Oral presentations for Young Scientists Poster Awards

14:35~15:25

座長 朝倉 哲郎、藤原 敏道

YP1 42 残基のアミロイドβ (Aβ42) 凝集体におけるクルクミンの相互作用部位の固体 NMR による解析

Analysis of interaction sites of curcumin with the fibrils of 42-residue amyloid β-protein(Aβ 42) using solid-state NMR

○増田 裕一<sup>1</sup>, 福地 将志<sup>1</sup>, 谷田川 達也<sup>1</sup>, 武田 和行<sup>1</sup>, 入江 一浩<sup>2</sup>, 竹腰 清乃理<sup>1</sup> (<sup>1</sup>京大理, <sup>2</sup>京大農)

YP2 固体 NMR による脂質膜表面において誘起される SWAP-70 PH ドメインの構造変化および機能の解析

A Solid-state NMR study of structural alteration and function of the PH domain induced at the membrane surface

○徳田 尚美<sup>1</sup>, 川合 克久<sup>1</sup>, 八木澤 仁<sup>1</sup>, 福井 泰久<sup>2</sup>, 辻 暁<sup>1</sup> (<sup>1</sup>兵庫県立大学大学院 生命理学研究科, <sup>2</sup>Natl. Hlth. Res. Inst., Taiwan)

YP3 固体 NMR 法および gauge-including projector augmented-wave(GIPAW)法による有機凝集構造の解析と構造精密化

Structural analysis and refinement of organic aggregation structure by combination of the solid-state NMR spectroscopy and the gauge-including projector augmented-wave (GIPAW) calculation

○鈴木 不律, 梶 弘典 (京大化研)

YP4 光照射固体 NMR による光受容タンパク質 ppR-pHtrII 複合体の負の走光性発現に関わる Tyr174 の局所動的構造変化の解析

Analysis of local dynamical and structural change at Tyr174 of photoreceptor protein ppR-pHtrII complex in relation to the negative phototaxis by in situ photo-irradiated solid-state NMR

○日高 徹郎<sup>1</sup>, 友永 雄也<sup>1</sup>, 川村 出<sup>1</sup>, 和田 昭盛<sup>2</sup>, 須藤 雄気<sup>3</sup>, 加茂 直樹<sup>4</sup>, 内藤 晶<sup>1</sup>  
(<sup>1</sup>横浜国立大学大学院工学府, <sup>2</sup>神戸薬科大学薬学部, <sup>3</sup>名古屋大学大学院理学研究科, <sup>4</sup>松山大学薬学部)

YP5 <sup>6</sup>Li MAS NMR による LiCoO<sub>2</sub> の微視的機構の解析:イオン拡散とスピン拡散

<sup>6</sup>Li MAS NMR of LiCoO<sub>2</sub> from a microscopic viewpoint: ion diffusion and spin diffusion

○野田 泰斗<sup>1</sup>, 水野 敬<sup>2</sup>, 竹腰 清乃理<sup>1</sup> (<sup>1</sup>京大理, <sup>2</sup>日本電子(株))

15:25~16:05

座長 池上 貴久、加藤 晃一

YP6 地磁気 NMR を用いたボトル内液体物の検査

Screening bottled liquids using Earth's Field NMR

○渡邊 翔大<sup>1</sup>, 赤羽 英夫<sup>1</sup>, 糸崎 秀夫<sup>1</sup> (<sup>1</sup>大阪大学院基礎工学研究科糸崎研究室)

- YP7 NQR リモートセンシングの電磁界シミュレーション  
Electromagnetic simulators of NQR remote sensing  
○中原 優<sup>1</sup>, 糸崎 秀夫<sup>1</sup>, 赤羽 英夫<sup>1</sup>, 篠原 淳一郎<sup>1</sup> (<sup>1</sup>大阪大学院基礎工学研究科糸崎研究室)
- YP8 廃水・廃棄物処理系バイオプロセスにおける <sup>13</sup>C 結晶セルロース分解過程の固・液時系列変動データマイニング  
Data mining of solid to solution dynamics during <sup>13</sup>C crystal cellulose degradation in the waste disposal bioprocess  
○飯倉 智弘<sup>1,2</sup>, 伊達 康博<sup>1,2</sup>, 山澤 哲<sup>3</sup>, 菊地 淳<sup>1,2,4,5</sup> (<sup>1</sup>横市院生命, <sup>2</sup>理研 PSC, <sup>3</sup>鹿島技研, <sup>4</sup>理研 BMEP, <sup>5</sup>名大院生命農)
- YP9 バイオマス・プロファイリングの実用に向けたサンプル条件の縦横的探索  
Correlation exploration of pretreatment conditions for application of biomass profiling.  
○篠 阿弥宇<sup>1</sup>, 坪井 裕理<sup>2</sup>, 林 裕志<sup>3</sup>, 菊地 淳<sup>1,3,4,5</sup> (<sup>1</sup>理研 PSC, <sup>2</sup>理研 ASI, <sup>3</sup>横市大院生命, <sup>4</sup>名大院生命農, <sup>5</sup>理研 BMEP)

16:05~16:20 休憩 / Break

16:20~17:10

座長 河合 剛太、若松 馨

- YP10 N...H...O 水素結合におけるプロトン移動ポテンシャル解明への核磁気緩和の適用  
Application of nuclear magnetic relaxation to elucidation of proton transfer potential of N...H...O type hydrogen bond  
○仲野 朋子<sup>1</sup>, 益田 祐一<sup>1</sup> (<sup>1</sup>お茶大院・理)
- YP11 <sup>13</sup>C メチル基をプローブとして用いるリジン側鎖を介した塩橋の解析法の開発  
A method developed for analysis of salt bridges mediated by lysine side chains using <sup>13</sup>C-methyl groups as probes  
○服部 良一<sup>1,2</sup>, 大木 出<sup>2</sup>, 古板 恭子<sup>1</sup>, 池上 貴久<sup>1</sup>, 深田 はるみ<sup>3</sup>, 白川 昌宏<sup>4</sup>, 藤原 敏道<sup>1</sup>, 児嶋 長次郎<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>阪大・蛋白研, <sup>2</sup>奈良先端大・バイオ, <sup>3</sup>阪府大・生命環境, <sup>4</sup>京大・工)
- YP12 ホスト-ゲスト化学による磁場配向誘起を用いた RDC 構造解析  
Structural Analysis with RDC induced by host-guest chemistry  
○諸原 理<sup>1</sup>, 藤田 大士<sup>1</sup>, 佐藤 宗太<sup>1</sup>, 山口 芳樹<sup>2</sup>, 加藤 晃一<sup>3,4,5</sup>, 藤田 誠<sup>1,5</sup> (<sup>1</sup>東大院工, <sup>2</sup>理研, <sup>3</sup>名市大院薬, <sup>4</sup>岡崎統合バイオ, <sup>5</sup>CREST)
- YP13 Nonlinear sampling と 3D MaxEnt を用いた迅速な 4D NOESY 測定の有用性の検証  
Application of nonlinear sampling and 3D MaxEnt processing to 4D NOESY experiments  
○重光 佳基<sup>1</sup>, 池谷 鉄兵<sup>1,2</sup>, 土江 祐介<sup>1</sup>, 三島 正規<sup>1</sup>, Daniel Nietlispach<sup>3</sup>, Markus Waelchli<sup>4</sup>, PeterGuentert<sup>2</sup>, Brian O. Smith<sup>5</sup>, 伊藤 隆<sup>1</sup> (<sup>1</sup>首都大理工, <sup>2</sup>Institute of Biophysical Chemistry, J. W. Goethe-University Frankfurt, <sup>3</sup>Department of chemistry, University of Cambridge, <sup>4</sup>ブルカーバイオスピ  
ン, <sup>5</sup>Division of Biochemistry and Molecular Biology, University of Glasgow)
- YP14 イノシトールリン脂質組み込み Nanodisc を用いたタンパク質-膜間相互作用解析  
Phosphoinositide incorporated Nanodisc:A tool for studying protein-membrane interactions  
○吉田 直樹<sup>1</sup>, 小橋川 敬博<sup>2</sup>, 原田 幸祐<sup>1</sup>, 小椋 賢治<sup>2</sup>, 横川 真梨子<sup>2</sup>, 稲垣 冬彦<sup>2</sup> (<sup>1</sup>北大院生命科学構造生物, <sup>2</sup>北大先端生命構造生物)

17:10~18:00

座長 片平 正人、廣明 秀一

- YP15 カルモジュリン C 末端残基の構造と機能における役割  
The role of C-terminal residues of calmodulin on its structure and function  
○黄 多率<sup>1</sup>, 北川 千尋<sup>2</sup>, 中富 晶子<sup>2</sup>, 大木 進野<sup>1</sup> (<sup>1</sup>北陸先端大学院大, <sup>2</sup>北大)

- YP16 放線菌由来カリウムチャネル KcsA のゲーティング機構の構造生物学的解析  
Structural basis underlying the dual gate properties of KcsA  
○今井 駿輔<sup>1</sup>, 大澤 匡範<sup>1</sup>, 竹内 恒<sup>1</sup>, 嶋田 一夫<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>東大薬, <sup>2</sup>BIRC/AIST)
- YP17 NMR スピンラベル法を用いた酵母ミトコンドリア酸化還元トランスロケータ Tim40 と FAD 結合型酸化酵素 Erv1 の相互作用解析  
NMR spin-label analysis on the interactions between an oxidative translocator Tim40 and a FAD-linked sulfhydryl oxidase Erv1 in yeast mitochondria  
○安西 高廣<sup>1</sup>, 河野 慎<sup>1</sup>, 寺尾 佳代子<sup>1</sup>, 遠藤 斗志也<sup>1</sup> (<sup>1</sup>名大院理)
- YP18 マウスフェロモン ESP1—受容体間相互作用の構造生物学的研究  
Structural study of interactions between mouse pheromone ESP1 and ESP1 receptor  
○平金 真<sup>1</sup>, 吉永 壮佐<sup>1</sup>, 佐藤 徹<sup>2</sup>, はが 紗智子<sup>2</sup>, 嶋田 一夫<sup>3</sup>, 東原 和成<sup>2</sup>, 寺沢 宏明<sup>1</sup>  
(<sup>1</sup>熊大院薬, <sup>2</sup>東大院農学生命, <sup>3</sup>東大院薬)
- YP19 転写抑制コファクターSHARP/SMRT 複合体の試料調製及び構造解析  
Structural studies on the transcriptional corepressor complex SHARP/SMRT and its preparation  
○三神 すずか, 伊藤 隆, 三島 正規 (首都大理)
- 

18:10~

日本核磁気共鳴学会評議員会 (401 会議室)

第2日目 11月16日(火) / Day 2 (Nov. 16, Tue.)

英語セッション / English session

9:30~10:35

Chairperson: Hideo Akutsu

L6 **Application of sulfobetaines to solution NMR of proteins and peptides**

○Kaori Wakamatsu<sup>1</sup>, Haimei Wang<sup>1</sup>, Kazuki Igarashi<sup>1</sup>, Ayumi Kamiya<sup>1</sup>, Masahiko Takahashi<sup>1</sup>, Fukuei Tezuka<sup>1</sup>, Long Xiang<sup>1</sup>, Takeshi Ishii<sup>1</sup>, Kazuo Hosoda<sup>1</sup>, Nobukazu Nameki<sup>1</sup>, Kenji Sugase<sup>2</sup> (<sup>1</sup>Grad. Sch. Eng., Gunma Univ., <sup>2</sup>Suntory Inst. Bioorg. Res.)

L7 **Invited Lecture 1**

**Allosteric Control of Environmental Sensors**

○Kevin Gardner (Departments of Biochemistry and Pharmacology, University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX USA)

10:35~10:50

Break / 休憩

10:50~12:20

Chairperson: Fuyuhiko Inagaki

L8 **Structure of RNA aptamer:prion protein complex and sliding of A3G on DNA**

Ayako Furukawa<sup>1</sup>, Tsukasa Mashima<sup>1</sup>, Ryo Iwaoka<sup>1</sup>, Takafumi Koshida<sup>1</sup>, Takashi Nagata<sup>2</sup>, Ryo Morishita<sup>3</sup>, Akihide Ryo<sup>4</sup>, Akifumi Takaori<sup>5</sup>, Fumiko Nishikawa<sup>6</sup>, Satoshi Nishikawa<sup>6</sup>, ○Masato Katahira<sup>1</sup> (<sup>1</sup>Inst. Advanced Energy, Kyoto Univ., <sup>2</sup>Nanobio., Yokohama City Univ., <sup>3</sup>CellFree Sci., <sup>4</sup>Grad. Sch. Med., Yokohama City Univ., <sup>5</sup>Grad. Sch. Med., Kyoto Univ., <sup>6</sup>AIST)

L9 **STRUCTURE AND FUNCTION OF THE N-TERMINAL NUCLEOLIN BINDING DOMAIN OF NUCLEAR VALOCINE CONTAINING PROTEIN LIKE 2 (NVL2)**

Yoshie Fujiwara<sup>1</sup>, Ken-ichiro Fujiwara<sup>2</sup>, Natsuko Goda<sup>1</sup>, Naoko Iwaya<sup>3</sup>, Takeshi Tenno<sup>1</sup>, Masahiro Shirakawa<sup>3</sup>, ○Hidekazu Hiroaki<sup>1</sup> (<sup>1</sup>Grad.Sc.Med., Kobe Univ., <sup>2</sup>Shionogi Co Ltd., <sup>3</sup>Grad.Sch.Eng., Kyoto Univ.)

L10 **Invited Lecture 2**

**NMR-based structural analysis of (large) protein complexes in solution**

Tobias Madl<sup>1,2</sup>, Bernd Simon<sup>3</sup>, Frank Gabel<sup>4</sup>, Cameron D. Mackereth<sup>5</sup>, Michael Nilges<sup>6</sup>, ○Michael Sattler<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>Helmholtz Zentrum München, Neuherberg, Germany; <sup>2</sup>TU München, Garching, Germany <sup>3</sup>EMBL, Heidelberg, Germany; <sup>4</sup>Institut de Biologie Structurale, Grenoble, France; <sup>5</sup>Institut Européen de Chimie & Biologie (IECB), Pessac, France; <sup>6</sup>Institut Pasteur, Paris, France)

---

12:20~13:50

Lunch / 昼食

(12:20~13:40 新評議員会と新理事会 (401 会議室))

---

13:50~14:40

Chairperson: Kiyonori Takegoshi

L11 **High Field, High Sensitivity Solid-State NMR at 14T by Dynamic Nuclear Polarization (DNP)**

○Yoh Matsuki<sup>1</sup>, Hiroki Takahashi<sup>1</sup>, Keisuke Ueda<sup>1</sup>, Toshitaka Idehara<sup>2</sup>, Isamu Ogawa<sup>2</sup>, Shinji Nakamura<sup>3</sup>, Mitsuru Toda<sup>3</sup>, Takahiro Anai<sup>3</sup>, Hideo Akutsu<sup>1</sup>, Toshimichi Fujiwara<sup>1</sup> (<sup>1</sup>Institute for Protein Research, Osaka University, <sup>2</sup>Research Center for Development of Far-Infrared Region, University of Fukui, <sup>3</sup>JEOL)

L12 **Detection of photo-intermediates in retinal proteins by in-situ photo-irradiated solid-state NMR**

○Akira Naito, Yuya Tomonaga<sup>1</sup>, Tetsuro Hidaka<sup>1</sup>, Izutu Kawamura<sup>1</sup>, Takudo Nishio<sup>1</sup>, Kazuhiro Ohsawa<sup>1</sup>, Akimari Wada<sup>2</sup>, Yuki Sudo<sup>3</sup>, Naoki Kamo<sup>4</sup> (<sup>1</sup>Grad. Sch. Eng. Yokohama Natl Univ, <sup>2</sup>Kobe Pharm. Univ., <sup>3</sup>Grad. Sch. Sci. Nagaya Univ. <sup>4</sup>Dept. Pharm. Matsuyama Univ.)

14:40~15:20

**Chairperson: Takehiko Terao**

L13 ***Honorary Lecture***

**NMR and MRI in Chemistry and Biomedical Physics & Engineering: My Research Profile of 43 Years in University**

○Hideaki Fujiwara (Department of Medical Physics and Engineering, Division of Health Sciences, Graduate School of Medicine, Osaka University)

15:25~15:35 Break / 休憩

15:35~16:00

**Chairperson: Yutaka Ito**

L14 **Protein structural determination using orientation induced TROSY shift changes**

○Shin-ichi Tate (Grad. Sch. Sci., Hiroshima Univ.)

16:00~16:40

**Chairperson: Yoshifumi Nishimura**

L15 ***Invited Lecture 3***

**Structure determination of the helical 7-transmembrane receptor sensory rhodopsin**

○Daniel Nietlispach, Antoine Gautier, John P. Kirkpatrick, Helen R. Mott, Mark J. Bostock (Department of Biochemistry, University of Cambridge)

16:40~18:00

**Chairperson: Masatsune Kainosho**

L16 ***Invited Lecture 4***

**Probing cancer cell signaling by NMR: structure, interaction, and kinetics of the small GTPase cycle**

Christopher B. Marshall, Mohammad Mazhab-Jafari, David Meiri, Geneviève M.C. Gasmi-Seabrook, Jason Ho, Robert Rottapel, Vuk Stambolic, and ○Mitsu Ikura (Division of Signaling Biology, Ontario Cancer Institute and Department of Medical Biophysics, University of Toronto)

L17 ***Invited Lecture 5***

**Chemical shifts and dipolar couplings: how can they help?**

Justin Lorieau, Nick Fitzkee, Alex Grishaev, John Louis, Yang Shen, and ○Ad Bax (Laboratory of Chemical Physics, NIDDK, NIH)

---

18:00~20:30

Banquet / 懇親会 (Tower Hall 2F 桃源)

第3日目 11月17日(水) / Day 3 (Nov. 17, Wed.)

日本語セッション / Japanese session

9:30~10:45

座長 楯 真一

- L18 Automated protein structure determinations from minimal sets of spectra using FLYA  
○池谷 鉄兵<sup>1,2</sup>, 池 駿求<sup>3</sup>, 浜津 順平<sup>1</sup>, 三島 正規<sup>1</sup>, 伊藤 隆<sup>1</sup>, 甲斐荘 正恒<sup>3,4</sup>, Peter Guentert<sup>2</sup>  
(<sup>1</sup>首都大理工, <sup>2</sup>Goethe-University Frankfurt 生物物理, <sup>3</sup>首都大戦略研究センター, <sup>4</sup>名大構造生物学センター)
- L19 高分子量蛋白質の構造解析に適した安定同位体ラベル法および測定法の開発  
Development of labeling strategies and pulse sequences suitable for structural analyses of large proteins  
○竹内 恒<sup>1,2</sup>, 高橋 栄夫<sup>1,3</sup>, 嶋田 一夫<sup>1,4</sup>, Gerhard Wagner<sup>2</sup> (<sup>1</sup>産総研・バイオメディカル情報研究センター, <sup>2</sup>ハーバード大医, <sup>3</sup>横浜市大院・生命ナノ, <sup>4</sup>東大院薬)
- L20 緩和分散解析用プログラム GLOVE  
Processing relaxation dispersion data with a new software GLOVE  
○菅瀬 謙治<sup>1,2</sup>, Jonathan C. Lansing<sup>2</sup>, Peter E. Wright<sup>2</sup> (<sup>1</sup>サントリー生有研, <sup>2</sup>The Scripps Res. Inst.)

10:45~11:00 休憩 / Break

11:00~12:15

座長 山本 泰彦

- L21 家蚕絹フィブロイン結晶部モデルペプチドのラメラ構造に関する固体 NMR 構造解析  
Structural analysis of synthetic model peptides from crystalline domain of *Bombyx mori* silk fibroin using solid state NMR  
○鈴木 悠, 小川 達也, 朝倉 哲郎 (農工大工)
- L22 チオフラビン T が結合するポリグルタミン局所構造の固体 NMR 研究  
Solid state NMR study on thioflavin T-bound polyglutamine local structure  
○松岡 茂<sup>1</sup>, 村井 元紀<sup>1</sup>, 山崎 俊夫<sup>2</sup>, 井上 将行<sup>1</sup> (<sup>1</sup>東大院薬, <sup>2</sup>理研 SSBC)
- L23 脂質ラフトにおける分子間相互作用の固体 NMR 解析  
Solid-State NMR Studies on Molecular Interactions in Lipid Rafts  
○松森 信明, 山口 敏幸, 鈴木 孝, 前田 佳子, 安田 智一, 岡崎 宏紀, 大石 徹, 村田 道雄  
(阪大院理)

---

12:15~13:15 昼食 / Lunch

13:15~14:45

ポスターセッション (奇数番号)

Poster Session (odd numbers)

---

14:45~16:00

座長 内藤 晶

- L24 NMR の信号と雑音  
NMR signal and noise  
○竹腰 清乃理 (<sup>1</sup>京大理)