

10-1 NMR 研究会

主題 = 多変量解析と NMR—埋もれた情報を発掘する

<趣旨> NMR 法は現在、化学、生物学の分野において、構造解析や分子運動解析に欠くことのできない分光法として存在しています。しかしながら、複雑な系になると観測されるピークの帰属に多大なエネルギーが割かれることも事実で、いかに効率的に帰属するかという方法論もここ 10 年の間に大変な進歩を遂げています。一方、数年前から複雑なピークの完全帰属は行わず、一連のスペクトル変化（化学シフト変化や強度変化）を統計的に処理し、問題解決につながる情報を取り出そうという解析手法（多変量解析）が、NMR 法の分野にも浸透してきています。この多変量解析は、統計学の分野では古くから知られている手法であり、早くから近赤外分光法などには応用されていました。ここ 2~3 年で、多変量解析が NMR 法の分野においても、その活躍の場を飛躍的に広げる可能性を秘めていることが明らかにされつつあり、今最もホットな研究分野の一つとなっています。今回、多変量解析の基礎、NMR 法へ応用するときの注意点、代謝系多変量解析の実際、高分子系への応用の注意点や現状等について討論する場を設けました。今回の研究会が、皆様の研究の発展につながる討論と交流の場として多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設けました。様々な関連分野からのポスター発表を期待します。今回から新たに“若手ポスター賞”を選考・授与しますので、奮ってご応募ください。

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（予定）
日時 平成 22 年 5 月 21 日（金）10:00~17:00
会場 独立行政法人 産業技術総合研究所 臨界副都心センター 別館 11 階 第一会議室
（東京都江東区青海二丁目 41 番地 6）
交通 東京臨海新交通ゆりかもめ テレコムセンター駅下車 徒歩約 4 分
<http://unit.aist.go.jp/waterfront/jp/index.html>

プログラム

<10:00~10:45>

1. 可視・近赤外スペクトルを用いた土壌成分値予測モデルの構築
(東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻) 船津公人

<10:45~11:30>

2. 多変量解析の前処理—より正確な定量性を求めて
(日本女子大学理学部物質生物科学科) 高橋征三

<12:30~14:30> ポスター発表

<14:30~15:15>

3. 代謝物からバイオマスへの物質創製・情報発現相関解析の試み
(理化学研究所/名古屋大学大学院/横浜市立大学大学院) 菊地淳

<15:15~16:00>

4. 合成高分子の NMR スペクトルへの多変量解析の応用
(東レリサーチセンター鎌倉 生物科学研究) 木村一雄

<16:00~16:45>

5. ^{13}C NMR スペクトルの多変量解析によるアクリル系共重合体のキャラクタリゼーション
(三菱レイヨン 横浜先端技術研究所/徳島大学工学部化学応用工学科) 百瀬陽

<16:45~17:00> 若手ポスター賞表彰式