

NMRを利用したAmphotericin Bチャネル複合体の構造解析

大阪大学 大学院工学研究科 氏名 山本 智也

目的 Amphotericin Bが形成するイオンチャネル構造から得られた固体NMRデータを解釈するために、Gaussianによってイオンチャネル中でのNMRピークをシミュレーションした。

内容 共同研究先で得られたMD計算の座標データをもとにGaussianによる量子化学計算ファイルを作成し、分子の配座からNMRピーク形状を推定する。

結果 実験結果に依存したピーク線幅の変化を量子化学計算によっても再現できた。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	392.03 時間
使用メモリ	30 GB
並列化	4ノード 並列