「溶媒中における蛋白質の立体構造予測：拡張アンサンブル法とRISM理論の複合アプローチ」

講演者氏名	木下正弘
所属	京都大学エネルギー理工学研究所
講演タイトル	「溶媒中における蛋白質の立体構造予測：拡張アンサンブル法とRISM理論の複合アプローチ」
講演概要	蛋白質立体構造サンプリングのための拡張アンサンブル法と、溶媒の効果を統計力学的に取り込むための積分方程式(RISM)理論との複合アプローチについて述べる。複合アプローチが、蛋白質と溶媒を同時に取り扱う通常のシミュレーション手法には見られない多くの利点を有することを示すと共に、残された問題や今後の展望について考察を行う。