

「分子シミュレーションによる蛋白質折れ畳み機構の解析」

講演者氏名	杉田 有治
所属	分子科学研究所分子基礎理論第一研究部門
講演タイトル	「分子シミュレーションによる蛋白質折れ畳み機構の解析」
講演概略	蛋白質の天然構造は、そのエネルギー曲面に含まれる複数の極小値の中でも、際だって低いエネルギー状態であると考えられている。しかし、通常の構造サンプリングの手法（MDやMC）では、無数のエネルギー極小値の中から天然構造を探し出すことは不可能であった。近年、我々は非常に強力かつ実行の容易な構造サンプリングの手法を開発した。本講演では、この手法に関して紹介する。