

「分極モデルポテンシャル関数を用いた生体分子の理論研究」

講演者氏名	中川節子
所属	金城学院大学
講演タイトル	「分極モデルポテンシャル関数を用いた生体高分子の理論研究」
講演概略	生体高分子の分子動力学シミュレーションでは、似たいポテンシャルが用いられているが、生体高分子のような不均一な系では、誘起分極などの多体効果を導入する必要がある。 本研究では、タンパク質モデル分子について分極モデルポテンシャルを作成し、シミュレーションからその評価を行う。ポテンシャルの精度という面でバイオサイエンスとの接点を考えてみたい。