

## Publications

- [1] J. Ohnuki, T. Sato, and M. Takano, Piezoelectric allostery of protein, *Phys. Rev E*, **94**, 012406 (2016).
- [2] K. Umezawa, J. Ohnuki, J. Higo, and M. Takano, Intrinsic disorder accelerates dissociation rather than association, *Proteins*, **84**, 1124–1133 (2016).
- [3] T. Sato, J. Ohnuki, and M. Takano, Dielectric allostery of protein: response of myosin to ATP binding, *J. Phys. Chem. B*, **120**, 13047-13055 (2016).

## Presentations

- [1] Y. Mizuhara, D. Parkin, and M. Takano, Critical role of cutoff parameter to calculate effective Born radii in simulating protein-protein interaction, Protein Electrostatics, Berlin, Jul. 19, 2016.
- [2] J. Ohnuki, T. Sato, and M. Takano, Piezoelectric allostery of protein, Protein Electrostatics, Berlin, Jul. 19, 2016.
- [3] K. Tezuka, R. Kiyama, D. Yamakoshi, D. Parkin, and M. Takano, Analysis of the ion pathway of Fo molecular motor using the revised structure with tilted  $\alpha$ -subunit helices., Biophysical Society of Japan, 54th Annual Meeting, Tsukuba, Nov. 18, 2016.
- [4] R. Moritake, T. Sato, Y. Suzuki, and M. Takano, Physical mechanism of introducing positive supercoils into bubble DNA by reverse gyrase, Biophysical Society of Japan, 54th Annual Meeting, Tsukuba, Nov. 18, 2016.
- [5] D. Parkin, Y. Mizuhara, and M. Takano, Physical understanding and computational guideline for the balance between Born and Coulomb energies, Biophysical Society of Japan, 54th Annual Meeting, Tsukuba, Nov. 18, 2016.
- [6] T. Sato, T. Sasaki, J. Ohnuki, and M. Takano, Local dielectric environment around myosin, Biophysical Society of Japan, 54th Annual Meeting, Tsukuba, Nov. 18, 2016.
- [7] J. Ohnuki, T. Sato, H. Okamura, T. Q. P. Uyeda, and M. Takano, Piezoelectric property of an actin filament, Biophysical Society of Japan, 54th Annual Meeting, Tsukuba, Nov. 18, 2016.

## Research Summary

- Accelerated MD 計算により圧電アロステリーをアクチンフィラメントにも見出した。
- MD 計算により ATP 結合に起因するミオシンの誘電アロステリーの別経路を解明した。
- MD 計算により ATP 結合に起因する誘電アロステリーを DNA 結合タンパク質に見出した。
- MD 計算により ATP 合成酵素におけるプロトン移動経路を見出した。
- 粗視化 MD 計算と Adaptive アンブレラ・サンプリング法によりタンパク質の disorder が相互作用相手からの解離を速めることにあることを示した。
- Onsager-Kirkwood-Fröhlich 理論を用いた解析によってミオシン周囲の水の誘電率の特異性を示した。