

## Publications

- [1] Y. Mizuhara, M. Takano, “Biased Brownian motion of KIF1A and the role of tubulin’s C-terminal tail studied by molecular dynamics simulation”, *Int. J. Mol. Sci.*, **22**, 1547(10 pages) (2021).
- [2] H. Sato, M. Sugishima, M. Tsukaguchi, T. Masuko, M. Iijima, M. Takano, Y. Omata, K. Hirabayashi, K. Wada, Y. Hisaeda, K. Yamamoto, “Crystal structures of hydroxymethylbilane synthase complexed with a substrate analog: A single substrate-binding site for four consecutive condensation steps”, *Biochem. J.*, **478**, 1023-1042 (2021).

## Presentations

- [1] J. Ohnuki, M. Takano, “Electrostatic ratcheting mechanism of peptide synthesis by nonribosomal molecular machine”, The 58th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, Online, Sept. 2020.
- [2] Y. Taguchi, Y. Mizuhara, J. Ohnuki, M. Takano, “Role of C-terminal tail of tubulin in microtubule kinesin binding”, 58th Annual Meeting of Biophysical Society of Japan, Online, Sept. 2020.
- [3] 大貫隼, 高野光則, “誘電アロステリーによるアクチン繊維の脱重合機構”, 第1回生体分子シミュレーション・モデリング研究会, オンライン開催, 2021年3月.

## Research Summary

- ・粗視化モデルを用いた MD 計算により分子モーターKIF1A の微小管上の1次元ブラウン運動と運動に一方向性が生じる物理機構とチューブリン C 末領域の寄与を解明した。
- ・新規に構造解析されたヘム前駆体合成酵素の全原子モデル MD 計算を行い、連続的なオリゴピロール合成機構と静電相互作用の関与を示した。
- ・新規に構造解析された非リボソーム分子機械の全原子モデル MD 計算を行い、連続的なオリゴペプチド合成機構と静電相互作用の関与を示した。
- ・アクチンフィラメントの重合・脱重合機構と制御機構に関わる圧電アロステリーおよび誘電アロステリーを解析した。