

Publications

- [1] J. Ohnuki, T. Sato, T. Sasaki, K. Umezawa, and M. Takano, Reply: Hydrophobic surface enhances electrostatic interaction in water, *Phys. Rev. Lett.*, **123**, 049602 (2019).
- [2] M. Iijima, J. Ohnuki, T. Sato, M. Sugishima, and M. Takano, Coupling of redox and structural states in cytochrome P450 reductase studied by molecular dynamics simulation, *Sci. Rep.*, **9**, 9341 (2019).

Presentations

- [1] 大貫隼, 高野光則, 誘電・圧電応答に基づく分子機械の運動機構, 第36回強誘電体応用会議, 京都, 2019年5月.
- [2] J. Ohnuki, T. Sato, T. Sasaki, K. Umezawa, and M. Takano, Hydrophobic surface enhances electrostatic interaction in water, The 13th Mini-Symposium on Liquids, Okayama, June 2019.
- [3] 大貫隼, 高野光則, pH-dependent charge-state and intermolecular interaction of actin, 日本生物物理学会第57回年会, 宮崎, 2019年9月.
- [4] J. Ohnuki, and M. Takano, Dielectric and piezoelectric allostery of actin and regulation of cofilin binding, The 11th Toyota Riken International Workshop, Nagoya, November 2019.
- [5] J. Ohnuki, and M. Takano, Allosteric pathway in protein explored by Ising machine, NetSci-X 2020, Tokyo, January 2020.
- [6] J. Ohnuki, and M. Takano, Actin depolymerization and cofilin binding induced by dielectric allostery, 64th Annual Meeting of the Biophysical Society, San Diego, February 2020.

Awards

- ・早稲田大学理工学術院総合研究所 第9期アーリーバードプログラム 若手研究者奨励賞

Research Summary

- ・ATP加水分解と共役した重合と脱重合により細胞運動を駆動するアクチン分子について、ATP加水分解、張力印加、pH変化を入力とした誘電・圧電アロステリー（誘電的、圧電的性質に起因した分子内遠方での分極）を発見した。
- ・疎水表面周りの水の局所誘電率分布について、水分子がもつ電気双極子の長距離相関を考慮した厳密な表式とより近似的な表式それぞれで得られる結果を比較することで、いずれの表式においても系の誘電的性質を捉えることができることを発見した。
- ・イジングマシンを用いた組合せ最適化技術をアロステリック経路探索に応用するため、経路探索の目的関数をイジングモデルのハミルトニアンで表現した。この目的関数をイジングマシンによって最小化し既知の経路を探索することに成功した。