

Cílem této práce bylo prozkoumat vliv subTHz elektrického pole na klíčový protein - tubulinový dimer, který je zásadní pro stabilitu, pohyblivost a dělení buněk. Tato studie byla provedena *in silico*, což znamená, že jsme systém studovali pomocí simulací. Pracovali jsme v rámci klasické molekulární dynamiky s využitím silových polí. Používali jsme balíček GROMACS spolu s našimi vlastními Python a bash skripty. Zabývali jsme se simulacemi molekulární dynamiky v neekvilibriu, protože bylo aplikováno externí elektrické pole (EEF). Abychom studovali vliv EEF na strukturu a stabilitu tubulinového dimeru, byly provedeny analýzy odchylek struktury (RMSD), fluktuací reziduí (RMSF) a dipólového momentu. Kromě toho jsme také analyzovali rotační pohyb způsobený EEF. Zkoumali jsme 15 různých frekvencí EEF - 10, 20, 30, ..., 150 GHz v 6 různých směrech. Pro statistické vyhodnocení byly všechny výpočty provedeny třikrát, pokaždé s různými počátečními rychlostmi přiřazenými před ekvilibrací, aby se prozkoumaly různé části fázového prostoru. Pro lepší výsledky je v budoucnu potřeba provést mnohem větší statistiku. Bohužel to nebylo možné, protože simulace byly již velmi výpočetně náročné. Přesto jsme se z našich výsledků mnoho naučili, například že elektrické pole s frekvencí 10 - 40 GHz mělo silný rotační efekt na tubulinový dimer, kde se otáčel tak, že jeho podélná osa se stala paralelní s oscilací elektrického pole. Co se týče konformačních změn, ty jsou zřejmé pro všechny frekvence a směry, ale opět je potřeba více statistiky. Kromě toho jsme zaznamenali určité změny v tuhosti částí tubulinu, které jsou důležité pro vazbu antitubulinových léků, jako jsou vinkalkaloidy, kolchicin a malý efekt na vazebné místo paclitaxelu. Dále byl pozorován vliv na β :M-loop a α :H1-B2 loop, které jsou důležité pro laterální interakce tubulinu v mikrotubulech. Vzhledem k tomu, že náš tubulin má také dva nestrukturované C-terminus konce (které jsou zásadní pro mnoho funkcí tubulinu, jako je vazba mikrotubulových asociačních proteinů), byli jsme schopni studovat jejich přepínání mezi různými konformačními soubory pod vlivem EEF. Tyto C-terminus konce jsou velmi citlivé na účinek EEF, protože jsou negativně nabitě a vnitřně neuspořádané.