

Biologické membrány se aktivně účastní řady procesů v živých buňkách, a detailní popis jejich struktury, dynamiky a funkce je tudíž nezbytný pro porozumění živým organismům na molekulární úrovni. V této práci jsme využili vysoké časové a prostorové rozlišení poskytované počítačovými simulacemi pro výzkum chování několika druhů molekul, které se mohou vázat do membrán buněk. Kombinace klasických simulací molekulové dynamiky a ab initio výpočtů elektronové struktury nám dovolila charakterizovat optické vlastnosti fluorescenčních sond zanořených v membránách, a tím přispět k rozvoji dvoufotonové polarizační mikroskopie jako nástroje strukturní biologie. Simulace molekulové dynamiky nám dále umožnily popsat na atomární úrovni vratnou vazbu rekovertinu k membráně a rovněž poskytly významný vhled do mechanismu vápníkem indukovaného myristoylového přepínače tohoto proteinu, důležitého pro adaptaci zrakových buněk. Kromě toho jsme zkoumali biologickou úlohu oxidace cholesterolu a porovnali dvě metody popisu membránového napětí v simulacích molekulové dynamiky.