Błona komórkowa to dwuwarstwa lipidowa, która oddziela komórkę od środowiska. Oprócz tego błona komórkowa odpowiada za utrzymanie gradientu elektrochemicznego między wnętrzem komórki, a jej otoczeniem oraz uczestniczy w procesach związanych ze wzrostem komórki, przekazywaniem sygnału oraz odpowiedzią immunologiczną. Tak wielką liczbę funkcji błona komórkowa zawdzięcza zawartym w niej białkom, które w swej strukturze zawierają α-helisy bądź β-beczki. Na działanie białek błonowych wpływają takie czynniki, jak: temperatura, pH, potencjał błonowy, obecność oddziałujących z nimi cząsteczek, jak również kompozycja lipidowa błony. Do tej pory poznano tysiące różnych fosfolipidów biorących udział w tworzeniu błony, a odmienna kompozycja lipidowa prowadzi do różnicowania błon między sobą ze względu na: grubość, upakowanie, zakrzywienie, płynność błony czy temperaturę przejścia fazowego.

Ponieważ białka i lipidy różnią się długością fragmentów hydrofobowych, tak zwane "niedopasowanie hydrofobowe" pojawia się, ilekroć te dwie długości różnią się znacznie. Białka, by zmniejszyć energię wynikającą z niedopasowania hydrofobowego, asocjują ze sobą, zmieniają swoją orientację w błonie lub indukują zmiany konformacyjne białka bądź fosfolipidów obecnych w bliskim kontakcie z białkiem. Asocjacja białek w wyniku niedopasowania hydrofobowego obserwowana jest dla wielu prostych białek, jak również i dla dużych układów, takich jak receptory. Niedopasowanie hydrofobowe uważa się za jeden z kluczowych mechanizmów segregacji białek między organellami komórkowymi.

Podobnie, na działanie białek wpływa upakowanie lipidów, które wynika z nasycenia wiązań w łańcuchach acylowych lipidów oraz obecności steroli. Zróżnicowana kompozycja lipidowa błony może prowadzić do utworzenia domen o różnym stopniu upakowania lipidów, które nie mieszają się ze sobą oraz różnią się między sobą płynnością i współczynnikiem dyfuzji. Uważa się, że upakowanie lipidów wspomaga wiązanie się białek ze sobą, na co wskazują wyniki badań eksperymentalnych nad niektórymi kompleksami białkowymi. Z drugiej strony, aby zapewnić poprawne funkcjonowanie w błonie, białka wykazują tendencję do selektywnego lokalizowania się w jednej z domen.

Od lat prowadzone są badania eksperymentalne i komputerowe z wykorzystaniem białek czynnych biologicznie, aby określić wpływ niedopasowania hydrofobowego oraz upakowania lipidów na asocjację białek i ich podział między domeny błony. Dodatkowo, aby ułatwić badania nad zjawiskami związanymi z niedopasowaniem hydrofobowym zaprojektowano proste, modelowe białka WALP. Jednakże, we wszystkich dotychczas przeprowadzonych badaniach należy uwzględnić obecność specyficznych oddziaływań między białkiem a błoną, które wynikają z określonej sekwencji aminokwasowej białka.

Celem naszych badań jest ustalenie, jak niedopasowanie hydrofobowe i upakowanie lipidów wpływają na asocjację białek i podział między domeny błony, wykorzystując do tego symulacje dynamiki molekularnej. Zaproponowany przez nas uproszczony model helisy transbłonowej wyklucza obecność specyficznych oddziaływań między helisami oraz z lipidami. Spodziewamy się, że wynikiem naszych badań jest uzyskanie prostej zależności, jak niedopasowanie hydrofobowe, oraz upakowanie lipidów wpływa na asocjację białek i podział między domenami błony. Nasze przewidywania chcemy zweryfikować zarówno na białku modelowym WALP, jak i na innych białkach aktywnych biologicznie.