

Významné artefakty vnáša do molekulovo-dynamických simulácií biologických systémov nezahrňanie elektónovej polarizability divalentných iontov, ako napríklad Ca^{2+} , do silových polí. Dve novo-vyvinuté úpravy parametrov silových polí boli použité na výpočet profilov voľnej energie iontovej disociácie $\text{Ca}^{2+}\text{-Cl}^-$ vo vodnom prostredí na porovnanie s profilmi voľnej energie získanými pomocou ab-initio molekulovej dynamiky a z experimentálnych dát neutrónového rozptylu.

Ďalej bol nasimulovaný dôkaz existencie lokálneho minima voľnej energie kontaktného iontového páru dvojice guanidínium-guanidínium vo vodnom prostredí. Výsledné profily naznačujú celkovú preferenciu kontaktného iontového páru.

Naknec sme skúmali pasívny mechanizmus prechodu oligoarginínov cez modelové systémy bunkovej membrány - lipidové vaky - metódami fluorescenčnej spektroskopie. V rámci tohto projektu sme objavili prepojenie medzi membránovým prechodom a agregáciou a zlučovaním lipidových vakov.