

Przedstawiona praca poświęcona jest analizie struktur białek, w tym struktur amyloidów w szczególności. W odróżnieniu od wewnętrznych algorytmów optymalizacji energii, które nie zawierają żadnych warunków wstępnych dotyczących struktury polipeptydu, proponowany w pracy model rozmytej kropli oliwy zakłada, że proces fałdowania jest napędzany obecnością wodnego rozpuszczalnika, który sprzyja micelizacji łańcucha polipeptydowego. FOD sugeruje, że trzeciorzędową budowę białka - szczególnie globularnego - można porównać do miceli sferycznej. Podczas procesu fałdowania, reszty hydrofilowe są eksponowane na powierzchni, podczas gdy reszty hydrofobowe są zatrzymywane wewnątrz białka. Wynikający z tego rozkład hydrofobowości może być modelowany matematycznie, jako 3D Gauss. Celem pracy jest stwierdzenie odmiennego charakteru oddziaływań niewiązących (elektrostatycznych, vdW) wobec rozkładu oddziaływań hydrofobowych. Te ostatnie charakteryzuje centralna koncentracja określana mianem jądra hydrofobowego z powierzchnią o charakterze polarnym. Zastosowana do jego opisu funkcja 3D Gauss odzwierciedla ten rozkład. Oddziaływania niewiązące (elektrostatyczne, vdW) nie wykazują tego typu charakterystyki, reprezentując rozkład typu R (jednostajny). W świetle tej analizy białka amolidowe nie wykazują odmienności wobec białek nie amolidowych.