

過冷却水中で成長する氷結晶の形態における結晶化潜熱の影響

Effect of latent heat of crystallization on morphology of ice crystal grown from undercooled water

三浦 均^{1*}, 灘 浩樹², 塚本 勝男¹

Hitoshi Miura^{1*}, Hiroki Nada², Katsuo Tsukamoto¹

¹東北大・理, ²産総研

¹Tohoku University, ²AIST

水の結晶化過程は、特殊なタンパク質の存在によって影響されることが知られている。代表的なものとしては、氷点下の南極海に生息する魚の体液が凍結するのを防ぐ凍結保護タンパク質 (Anti-Freeze Protein, AFP) や、比較的小さな過冷却度で水の均質核形成を誘発する氷核活性細菌 (Ice-Nucleation Protein, INP) が挙げられる。これらのタンパク質分子がどのように水の結晶化に影響を及ぼすかについては、よく分かっていない。その理由のひとつに、タンパク質分子の三次元構造解析が困難であるため、分子の構造が良く分かっていない点が挙げられる。一方、構造解析とは異なるアプローチとして、INPs (*Xanthomonas Campestris* [1])を加えた過冷却水中における結晶成長速度の測定が近年行われつつある[2]。これにより、過冷却度やタンパク質濃度に応じてそれぞれの結晶面の成長速度が変化し、氷の形態が変化するという観察事実が得られている。しかし、このような成長速度の変化が、氷結晶表面とタンパク質分子の相互作用によるものなのか (界面カイネティクス)、成長環境要因 (結晶化潜熱の解放による局所温度上昇、タンパク質溶液濃度の局所変化) によるものなのかについては、実験結果に基づいたさらなる議論が必要であろう。

本研究では、水が結晶化する際の潜熱が、氷の成長速度やその異方性に与える影響を数値計算によって評価することを目的とした。タンパク質分子が氷のある方向の成長を抑制した場合、発生する結晶化潜熱の総量が低下するため、結果として他の方向の成長速度を速める効果が期待される。

氷のbasal面方向とそれに垂直なa軸方向の成長を考慮した二次元の計算を実施した。計算手法としては、結晶成長を扱う数理モデルであり、潜熱の解放による局所的な温度上昇、非定常熱拡散、界面過冷却度に比例した結晶成長速度を扱うことが可能なフェーズフィールド法[3]を採用した。タンパク質がbasal面に吸着する効果は、basal面におけるkinetic係数を人為的に小さくすることで取り入れた。計算の結果、basal面方向の成長を抑制することで、a軸方向の成長が促進されることが明らかとなった。また、過冷却度を変えてみると、低過冷却度の場合よりも、高過冷却度のほうがより顕著に影響が出ることが分かった。この結果は、タンパク質分子が氷結晶の成長を抑制する効果を持っていたとしても、それが特定の面に対してのみ効果を及ぼす場合、それ以外の方向の結晶成長速度が促進し、結果として結晶の形態が変化しうることを示している。

References:

[1] Wilson et al., *Env.Microbiol.* 8, 1816 (2006). [2] Nada et al., in prep. [3] Wang et al., *Physica D* 69, 189-200 (1993).

キーワード:氷結晶,形態,タンパク質,結晶化潜熱,数値シミュレーション

Keywords: ice crystal, morphology, protein molecules, recalescence, numerical simulation