

Moleküldynamik-Simulation von Antifrierproteinen an der Eis-Wasser-Grenzfläche

Julian Gerhäuser, Heike P. Karbstein, Volker Gaukel, Marc Wittner, Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Bio- und Lebensmitteltechnik Teilinstitut I: Lebensmittelverfahrenstechnik, Karlsruhe/Deutschland

Unter dem Begriff Antifrierproteine (AFP) können viele Proteine aus verschiedenen Organismen wie zum Beispiel Fischen, Insekten und Pflanzen zusammengefasst werden. Alle diese Proteine besitzen die Eigenschaft mit der Grenzfläche zwischen Eis und Wasser zu interagieren, wodurch die Rekristallisation verhindert, oder eine Gefrierpunktniedrigung erzielt werden kann. Außerdem wird die Form der Eiskristalle verändert. Dabei reichen bereits sehr niedrige AFP-Konzentrationen, um einen Effekt zu erzielen. Diese Eigenschaften machen Antifrierproteine interessant für industrielle Anwendungen. Bei der Lagerung gefrorener Produkte kann es durch Eiswachstum und Rekristallisation zu einer Schädigung und Verminderung der Produktqualität kommen. Ein Beispiel ist der Verlust der Cremigkeit von Speiseeis. Dieser Qualitätsverlust kann nachweislich durch den Einsatz von AFP verringert werden. Auch in anderen Gebieten wie der Kryokonservierung von Organen und Geweben, sowie der Kältetechnik können AFP vorteilhaft eingesetzt werden. Jedoch ist die Aufreinigung der Proteine aufwendig und deshalb sehr kostspielig. Daher werden alternative Substanzen, die ebenfalls mit dem Eiskristall interagieren. Um die Suche zu systematisieren, muss der Interaktionsmechanismus von AFP an der Eisgrenzfläche genauer untersucht und verstanden werden. Zu diesem Zweck wurden Moleküldynamik-Simulationen ausgewählter AFP an der Eis-Wasser-Grenzfläche durchgeführt. Im Mittelpunkt der Untersuchungen standen hierbei die Wechselwirkungen zwischen den Seitenketten der Proteine und den Wassermolekülen des Eisgitters.