

Analyse der Eisoberflächenstruktur nach Bindung eines Antiegefrierproteins und deren Zusammenhang mit der Gibbs-Thomson Gleichung

Julian Gerhäuser, Volker Gaukel, Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Bio- und Lebensmitteltechnik Teilinstitut I: Lebensmittelverfahrenstechnik, Karlsruhe/Deutschland

Antiegefrierproteine (AFP) sind durch ihre Oberflächenbindung an Eiskristalle in der Lage, das Eiskristallwachstum und den Rekristallisationsprozess aufgrund des Gibbs-Thomson-Effekts zu beeinflussen. Die Bindung der AFP führt zur Bildung einer gekrümmten Eisoberfläche und es wird allgemein angenommen, dass es einen kritischen Eiskristallradius zwischen den Proteinen auf der Eisoberfläche gibt, der die maximale thermische Hysterese bestimmt. In dieser Arbeit wird mit Hilfe von Molekulardynamiksimulationen (MD) die resultierende dreidimensionale Oberflächenstruktur eines Eiskristalls unter Bindung eines AFP (*spruce budworm* AFP [1]) analysiert und die Lage des kritischen Radius ermittelt. Im Gegensatz zu früheren Erwartungen aus der Literatur konnten wir zeigen, dass sich der kritische Radius nicht direkt zwischen den adsorbierten Proteinen befindet. Darüber hinaus haben wir gezeigt, dass die minimale Temperatur, bei der das System nicht einfriert, sehr gut mit dem mit der Gibbs-Thomson-Gleichung berechneten Wert am kritischen Radius übereinstimmt, sofern dynamische Systembedingungen berücksichtigt werden. Dies beweist zum einen, dass der Gibbs-Thomson-Effekt die Grundlage der Eiskristallwachstumsbehinderung ist und dass MD-Simulationen für die Vorhersage der Schmelzpunktsenkung durch AFP geeignet sind [2].

Die gewonnenen Erkenntnisse sollen in zukünftigen Arbeiten auf andere Moleküle und Lösungen übertragen werden.

[1] Graether SP, Kuiper MJ, Gagné SM, Walker VK, Jia Z, Sykes BD, Davies PL. Beta-helix structure and ice-binding properties of a hyperactive antifreeze protein from an insect. *Nature*. 2000 Jul 20;406(6793):325-8. doi: 10.1038/35018610. PMID: 10917537.

[2] Gerhäuser J, Gaukel V. Detailed Analysis of the Ice Surface after Binding of an Insect Antifreeze Protein and Correlation with the Gibbs-Thomson Equation. *Langmuir*. 2021 Sep 29. doi: 10.1021/acs.langmuir.1c01620. Epub ahead of print. PMID: 34585573.