食品タンパク質の水分活性と水和のミクロ構造

日本原子力研究開発機構
物質科学研究センター
階層構造研究グループ
中川　洋

【はじめに】

水分活性は、食品と純水の水蒸気圧の比として厳密に定義された、食品の保存性や品質を評価する熱力学量である。一方、水分活性が意味する食品中の水の状態は、水分収着等温特性で分類された結合水や自由水などによる定性的な説明にとどまっており、水の物理化学特性と水分活性との関係性はあいまいな点が多い。本研究では、分子運動性の解析や水和構造の可視化ができる中性子非弾性散乱と分子シミュレーションの融合解析により、食品中の水の物理化学的状態や食品と水との相互作用を調べ、水分活性が意味する食品の水和状態を調べた。また乾燥食品は、水分活性値を下げることで腐敗の原因となる微生物の増殖を抑えるとともに、ガラス状態にすることで食品の安定性を向上させている。食品のガラス化は食感とも関わるため、食品の品質を決める重要な要因となる。水分活性とガラス転移との関係性の解明も食品物性の基礎研究として重要である。研究を通じて、水分活性から保存性や食感といった食品機能物性を予測するための分子論的基礎の確立を目指している。

【中性子散乱による水和水ダイナミクスとガラス転移の解析】

中性子非弾性散乱は、水素原子の大きな非干渉性散乱能を利用した水のダイナミクスの研究や、THz 周波数領域に特徴的なガラスの分子ダイナミクスなど、物質・生命科学研究で活用されている振動分光法の一種である。中性子線は透過性が高く、非破壊的に分子ダイナミクスを観測できるという特徴がある。このような中性子振動分光法では、食品中の水やガラス状態のミクロ構造ダイナミクスを直接観測することができ、食品の構造―機能相関解析において、ミクロ構造と関係した食品物性の発現機構解明に威力を発揮すると期待できる。中性子線の重要な特徴の一つは、水素原子の非干渉性原子散乱長が他の原子と比べ大きいことである。下図 1 のように水素の同位体コントラストを利用することで、食品と水分子のダイナミクスを分離して観測することができる。講演では、これら中性子線の特性を活かした、タンパク質のガラス転移と水和水ダイナミクスの関連性についての実験結果を示す。中性子散乱が食品科学の分野で活用されたことはこれまでにあまりなかったが、分子ダイナミクスについてのユニークな情報を与える中性子非弾性散乱は、水と相互作用することによって発現する食品物性について興味深い知見を与える可能性があることが分かってきた。

【分子シミュレーションによる水和構造と水素結合ダイナミクスの解析】

分子シミュレーションでは、水和構造を可視化することができ、実験データの解釈に便利な研究手法である。ここでは、水分量の増加に伴う水分子間および水と蛋白質の間の水素結合の寿命の変化や、蛋白質表面の水素結合を介した水和水ネットワークの解析などを行った。その結果、ガラス転移などの蛋白質の食品物性を決める要因として、水との間の水素結合の相互作用が重要であることを示唆する結果が得られた。また中性子散乱実験の結果と合わせることで、水分活性が水の拡散係数、水和水のネットワーク形成、水素結合ダイナミクス、ガラス転移と相関関係にあることが分かり、水分活性は、水の分子運動に関する定量的

な物理量から説明できることが示唆された(図2)。

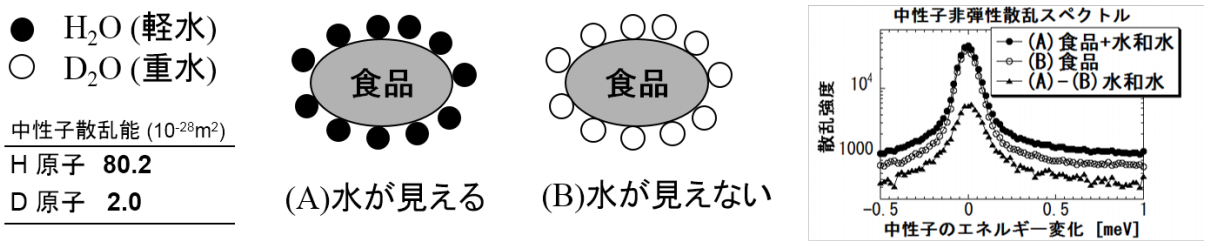

図1 同位体コントラストによる食品と水和水の中性子非弾性散乱スペクトルの分離方法

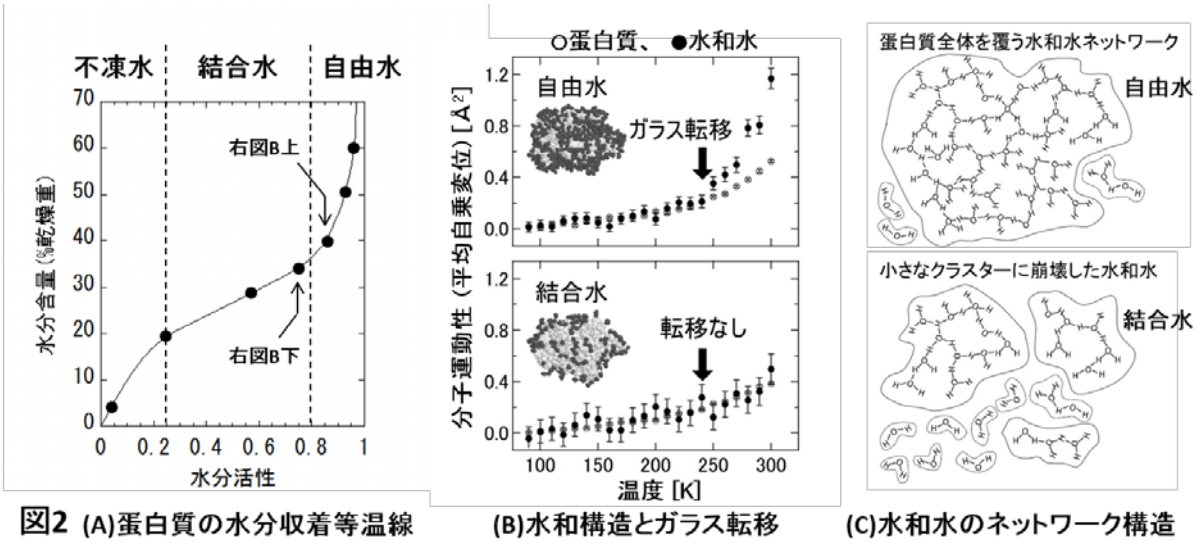

図2 (A)蛋白質の水分収着等温線　(B)水和構造とガラス転移　(C)水和水のネットワーク構造

【参考文献】

1) 中川洋 *et al.* (2017) *加速器.* 13:214-219

2) Nakagawa H.. *et al.* (2015) *RADIOISOTOPES.* 64:647-659

3) 中川洋 *et al.* (2015) *冷凍(日本冷凍空調学会誌).* 90: 569-573

4) 中川洋. *et al.* (2014) *日本食品科学工学会誌* 61:323-328

5) Doster W., Nakagawa H. *et al.* (2013) *J. Chem. Phys.* 139:045105

6) Nakagawa H. *et al.* (2010) *J. Phys. Soc. Jpn.* 79:083801

7) Kataoka M., Nakagawa H. (2010) *Water, the forgotten biological molecule, Pan Stanford publishing, Singapore,* 49-62

8) Nakagawa H. *et al.* (2008) *Biophys. J.*. 95:2916-2923