


生物の中で起こる巧みな結晶形成制御の謎をコンピューターで解明

	研究者氏名 なだ ひろき 灘 浩樹	所属機関 産業技術総合研究所 環境管理 研究部門 主任研究員	関連キーワード(複数可) 結晶成長、計算科学、バイオミネラリゼーション、ハイブリッド材料、機能性分子、氷化学物理
	主な研究テーマ ・炭酸カルシウムの結晶核生成と結晶成長のメカニズムに関する計算科学研究 ・不凍タンパク質による氷の成長制御メカニズムに関する計算科学研究	主な採択課題 ・新学術領域研究(研究領域提案型) 平成22～26年度(配分総額:57,070千円) 課題名「分子制御による融合マテリアル形成の計算科学シミュレーション」	

① 科研費による研究成果

生物中では様々な構造や機能を持つ結晶が巧みにつくられる。それらのでき方を探ることにより、材料開発に役立つヒントが沢山得られる。

本研究では、貝殻等を構成する炭酸カルシウムの結晶核生成(結晶の“芽”ができること)と結晶成長(結晶が大きくなること)のメカニズムをコンピューター・シミュレーションで追究し、以下の成果を得た。

- ・結晶核生成において生成する構造がマグネシウム添加により制御されるメカニズムを明らかにすることに成功した。結晶材料の構造を制御する新しい方法をつくるためのヒントとなる成果である。

- ・結晶表面の水が有機分子などの吸着を支配し、それにより成長や結晶形が制御される新しいメカニズムを発見した。結晶材料の形を有機分子で制御する方法の開発につながる成果である。

また、寒冷地の生物に含まれる不凍タンパク質による氷の成長制御メカニズムをコンピューター・シミュレーションで明らかにすることに成功した。生物の耐凍結メカニズムの解明や水の凍結制御技術の開発につながる成果である。

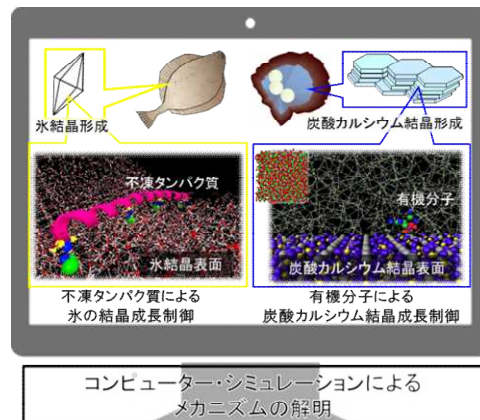


図: 本研究の概要

② 当初予想していなかった意外な展開

・物理、化学、計算科学の異分野が融合した新しいタイプの研究成果として、従来あまり関係がなかった分野も含めて予想外に幅広い分野で大いに注目された。その結果として、高分子学会ではホットピックスに選出され、油化学会ではオレオサイエンス賞の受賞につながった。

③ 今後期待される波及効果、社会への還元など

- ・本研究成果は、これまで人間が作り出すことができなかった高強度な結晶材料、しなやかで強靱な材料、壊れたら自己修復するような機能材料などの開発に役立つと期待される。
- ・不凍タンパク質の研究成果は、臓器や食品の冷凍保存など水の凍結を自在に制御する技術への波及が期待される。