

## ASSESSMENT OF OVARIES HISTOLOGICAL CONDITION OF ANTARCTIC TOOTHFISH *DISSOSTICHUS MAWSONI* (NOTOTHENIIDAE) IN THE DIFFERENT REGIONS OF CATCH

S.V. Piyanova

Russian Federal Institute of Fisheries and Oceanography (VNIRO), Moscow, Russia  
pjanova@vniro.ru

The results of the histological comparative analysis of the Antarctic toothfish reproductive system, caught in different regions during two fishing seasons, 2005–2006 in austral summer are presented. The morphological parameters of females, indices of gonads and condition by Fulton have been described. The histological criteria of the assessment of the ovary maturity stages, cytological parameters and size composition of oocytes, and type of the toothfish oogenesis have been determined. It was obtained that for Antarctic toothfish during the fishing period the individuals with gonads of the late III stage of maturity were dominated. Their ovaries contained two groups of vitellogenous oocytes. The large oocytes of the nearest spawning season have composed minority group of total cell number.

## НЕНАСЫЩЕННЫЕ ЦЕПИ МОЛЕКУЛ ФОСФОЛИПИДОВ И СВОЙСТВА ГИДРАТИРОВАННЫХ ЛИПИДНЫХ БИСЛОЕВ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

А.Л. Рабинович<sup>1</sup>, А.Р. Lyubartsev<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Учреждение Российской академии наук Институт биологии Карельского научного центра РАН,  
Петрозаводск, Россия  
rabinov@krc.karelia.ru

<sup>2</sup> Department of Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University, Stockholm, Sweden

Большую актуальность приобрели в последние годы исследования различных самоорганизующихся систем. Интерес к этим вопросам обусловлен стремлением не только расширить и углубить знания о фундаментальных законах природы, но и использовать принцип самоорганизации, как таковой. Изучение биологических мембран, бислоев и их отдельных компонентов – важнейшее направление в этом ряду.

В настоящей работе проведено компьютерное моделирование методом молекулярной динамики совокупности гомогенных бислоевых систем, образованных липидными молекулами с неразветвленными углеводородными цепями, – насыщенной sn-1 и ненасыщенной sn-2. Двойные связи последней были во всех вариантах метиленпрерывающимися. Липиды различались количеством двойных связей в sn-2 цепи во всем возможном диапазоне, при постоянном количестве углеродных атомов в цепях sn-1 и sn-2; длиной цепи sn-1 во всех вышеперечисленных вариантах липидных молекул с sn-2-цепями разной ненасыщенности; длиной цепи sn-2 для бислоев из полиненасыщенных липидов. Липиды рассмотренного строения входят в состав мембран большинства биологических объектов. Моделирование осуществлено в одинаковых условиях по температуре, давлению, методике проведения имитации.

Рассчитан ряд важных характеристик: профили плотности масс разных атомов и групп атомов вдоль нормали к поверхности каждой из мембран; средние положения разных атомов вдоль нормали; среднеквадратичные пространственные тепловые флуктуации атомов углеводородных цепей разного типа и полярных головных групп молекул липидов; профили параметров порядка всех связей молекул относительно нормали к поверхности бислоя; функции распределения векторов-связей по ориентациям относительно нормали к поверхности. Проведена аппроксимация последних и установлены соотношения между характеристиками функций распределения и типом связи (простая, двойная), ее расположением в цепи, величиной ее параметра порядка. Такой подход дает возможность выявить физическую картину упорядочения каждой связи в липидных молекулах разных типов. Проведен анализ различий в свойствах разных бислоевых систем.

Показано, что в гидратированном липидном бислое, образованном молекулами фосфатидилхолинов, среднеквадратичные пространственные тепловые флуктуации (вдоль нормали  $Z$  к поверхности бислоя, RMSZ) атомов относительно своих равновесных положений не являются одинаковы-

ми, они существенно зависят от местоположения атома в липидной молекуле. Наименьшие значения величин RMSZ соответствуют атомам глицеринового основания молекулы ФХ, в особенности атому углерода в «развилке» глицеринового основания. Тепловые флуктуации атомов, RMSZ, увеличиваются по мере продвижения от глицеринового основания по направлению (I) к атому азота вдоль цепи полярной головной группы липидов и (II) в наибольшей степени – вдоль жирнокислотных ацилов от групп C=O по направлению к концевым группам CH<sub>3</sub>. В насыщенных *sn*-1 углеводородных цепях это увеличение RMSZ вдоль по цепи как атомов углерода, так и соответствующих атомов водорода является монотонным. В ненасыщенных *sn*-2 углеводородных цепях тенденция к увеличению флуктуаций RMSZ атомов вдоль по цепи по направлению к свободным концам также имеет место, но рост RMSZ монотонным не является. В моноеновой *sn*-2 цепи 18:1(*n*-9)*cis* липидной молекулы флуктуации RMSZ атомов углерода № 9 и № 10 при двойной связи превышают величину флуктуаций RMSZ соответствующих по номеру атомов углерода насыщенной *sn*-1 цепи того же бислоя («C=C-эффект»); при этом RMSZ атомов углерода двойной связи C=C больше по величине, чем RMSZ атомов углерода тех CH<sub>2</sub>-групп, которые примыкают к двойной связи с обеих сторон. В полиеновых *sn*-2 цепях «C=C-эффект» тоже наблюдается, но его характер для той или иной двойной связи может претерпевать изменения. Характер зависит от количества, местоположения двойных связей в данной цепи, длины цепи. Нарушения «C=C-эффекта» наблюдаются для некоторых двойных связей, либо расположенных очень близко к группам C=O, т.е. к полярной головной группе липидов, где флуктуации RMSZ двойных связей, по-видимому, более затруднены, чем флуктуации связей простых, либо вблизи конца насыщенной цепи *sn*-1 при наличии в молекуле липида ненасыщенной цепи *sn*-2, более длинной, чем *sn*-1.

В центральной части зависимостей среднеквадратичных пространственных флуктуаций RMSZ атомов углерода от номера атома вдоль насыщенной *sn*-1 и ненасыщенной *sn*-2 цепи гидратированного липидного бислоя (т.е. профилей RMSZ) существует участок сравнительно медленного роста RMSZ (участок «плато»); заметный рост величин RMSZ наблюдается лишь для ~5–6 атомов, наиболее близких к концу цепей (к центру бислоя).

Угловые флуктуации относительно наиболее вероятного направления связи для C-H-связей CH<sub>2</sub>-групп, примыкающих с обеих сторон к *cis*-двойным связям C=C в липидных цепях всех бислоев, оказались больше, чем угловые флуктуации C-H-связей при двойных связях C=C («эффект уширения ориентационных функций распределения»).

«Эффект уширения», а также «C=C-эффект» основаны на фундаментальных особенностях внутреннего вращения в ненасыщенных цепях и иллюстрируют физический механизм, который приводит к формированию более высокой равновесной гибкости ненасыщенных и полиненасыщенных углеводородных цепей по сравнению с насыщенными.

Средние *Z*-положения ( $\langle Z \rangle$ ) центров концевых атомов C насыщенных *sn*-1 цепей противоположных монослоев изученных бислоев могут перекрываться (концевые атомы цепей одного монослоя – проникать в область другого, или располагаться очень близко друг к другу. Аналогичного перекрывания или сближения для ненасыщенных *sn*-2 цепей не отмечено ни в одном из 16 исследованных бислоев, хотя в серии бислоев 16:0/... ФХ наблюдается более заметное сближение концевых атомов ненасыщенных *sn*-2 цепей, чем в серии бислоев 18:0/... ФХ. Таким образом, толщина углеводородной области группы бислоев 18:0/... ФХ с насыщенной *sn*-1 углеводородной цепью 18:0 и ненасыщенной *sn*-2 цепью определяется главным образом насыщенной цепью 18:0, а толщина аналогичных бислоев 16:0/... ФХ с более короткой насыщенной *sn*-1 цепью может определяться не только насыщенной 16:0, но и (частично) ненасыщенной цепью *sn*-2.

Основной эффект, который вызывает замена в насыщенной углеводородной цепи одной или нескольких простых связей C-C на двойные C=C (но так, чтобы последние были метиленпрерывающимися), состоит в резком уменьшении упорядочения тех простых связей C-C, которые оказываются непосредственными соседями двойных, и в возрастании степени упорядочения двойных связей по сравнению со связями соответствующей насыщенной цепи.

Профили параметра порядка  $-S_{CH}$  связей C-H ненасыщенных цепей обладают характерными «провалами» на участках локализации двойных связей *cis*-: параметры  $S_{CH}$  двух связей C-H во фрагментах H-C=C-H оказываются неодинаковыми.

Системы, содержащие цепи с наиболее протяженными полиеновыми участками, существенно выделяются по своим характеристикам. Причины различий являются фундаментальными, они связаны с раз-

личиями во внутренних вращениях. Совокупность этих особенностей можно рассматривать как молекулярный механизм, который и обеспечивает реализацию свойств цепей того или иного строения.

Работа поддержана РФФИ (проект 10-03-00201а), программой Президента РФ «Ведущие научные школы» НШ-3731.2010.4 и Visby programme 00961/2008.

## UNSATURATED CHAINS OF PHOSPHOLIPID MOLECULES AND PROPERTIES OF HYDRATED LIPID BILAYERS: COMPUTER SIMULATIONS

A.L. Rabinovich<sup>1</sup>, A.P. Lyubartsev<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institute of Biology, Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences, Petrozavodsk, Russia  
rabinov@krc.karelia.ru

<sup>2</sup> Department of Materials and Environmental Chemistry, Stockholm University, Stockholm, Sweden

In order to investigate systematically the role of double bonds in physical properties of lipid membranes we have carried out series of molecular dynamics simulations of hydrated liquid crystalline phase phosphatidylcholine bilayers consequently changing the number of double bonds in the *sn*-2 chain of phospholipids having *sn*-1 saturated and *sn*-2 unsaturated chains. Different equilibrium structural and dynamic parameters of the bilayers were defined.

## СТРОЕНИЕ, СВОЙСТВА, ФУНКЦИИ ДЛИННОЦЕПОЧЕЧНЫХ ПОЛИНЕНАСЫЩЕННЫХ ЖИРНЫХ КИСЛОТ (ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО)

А.Л. Рабинович, П.О. Рипатти

Учреждение Российской академии наук Институт биологии Карельского научного центра РАН,  
Петрозаводск, Россия  
rabinov@krc.karelia.ru

Основу биологических мембран образуют молекулы фосфолипидов. Ключевое значение для функционирования биомембран имеют полиненасыщенные (ПН) цепи липидов. Большинство жирнокислотных (ЖК) цепей имеет длину  $N = 12, \dots, 22$  углеродных атома и количество двойных  $C=C$  связей  $k = 1, 2, \dots, 6$ , двойные связи являются метиленпрерывающимися. В некоторых биомембранах, наряду с перечисленными выше, обнаружены цепи «необычные», выделяющиеся по этим параметрам из общего ряда цепей (их длина  $N$  достигает  $\sim 38-40$  углеродных атомов). Подобные необычные цепи идентифицированы в составе липидных молекул мембран многих организмов, – это общебиологическое явление. Обнаружено, что необычно длинные цепи находятся в составе молекул фосфатидилхолинов (ФХ) тоже исключительно необычных типов. Их необычность в том, что длинные цепи локализованы в положении *sn*-1 глицеринового основания, тогда как в молекулах ФХ «обычных» типов положение *sn*-1, как правило, занято насыщенной углеводородной цепью (например, 16:0, 18:0). При этом в положении *sn*-2 молекул ФХ как обычных, так и необычных типов, расположены обычные насыщенные, мононенасыщенные или ПН цепи длиной  $N < 24$ .

Экспериментальные данные о свойствах необычных ЖК цепей (встречающихся в малых количествах) в литературе фактически отсутствуют или чрезвычайно скудны. В настоящей работе методом статистических испытаний (Монте-Карло, МК) проведена компьютерная имитация конформационного поведения одной из типичных совокупностей необычных ПНЖК цепей. Изучены при температуре 25°C свойства набора необычных ПН цепей, избранного в итоге анализа биохимических данных для многих объектов:  $N:4(n-6)cis$ ,  $N:4(n-3)cis$ ,  $N:5(n-6)cis$ ,  $N:5(n-3)cis$ ,  $N:6(n-6)cis$ ,  $N:6(n-3)cis$ . Количеством атомов углерода было четным,  $N = 24, 26, 28, \dots, 38$ . Вычислены характеристики равновесной гибкости цепей.

Оказалось, что конкуренция влияния на свойства цепи количества  $k$  двойных связей и их местоположения приводит к совпадению величины гибкости в результате специфического «ком-