

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. Rabinovich¹, A.P. Lyubartsev²

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

² 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-

пенсационного эффекта». Выявленный компенсационный эффект представляется чрезвычайно важным: компенсация достигается в том случае, когда количество двойных связей сокращается на единицу (что уменьшает гибкость цепи) при одновременном смещении всей группы двойных связей на 3 углеродных атома к середине цепи (что увеличивает гибкость). Выполняется ли это правило для всех номеров j атомов углерода вдоль по цепи рассмотренных необычных ацилов, а также ацилов в ином диапазоне N , подлежит дальнейшему исследованию, но оно выполняется, во всяком случае, при $j=3$ и 6 .

Равенство гибкостей у подобных цепей с равным N означает, что их вклад в жидкость мембраны примерно одинаков. Кроме того, известны данные о температурных коэффициентах размеров ПНЖК. Это позволяет развить концепцию о локализации молекул липидов с такими необычными цепями в специальных областях: пограничных слоях с мембраносвязанными включениями, белками. В ее пользу свидетельствует также необычное, *sn-1*, расположение этих ПН цепей в липидной молекуле, – при том, что вторая (обычная) ПН цепь локализована в положении *sn-2*.

Исследование свойств необычных ПН цепей липидов позволяет продвинуться к более глубокому пониманию взаимосвязей «структура – свойства – функции» для молекул обширного класса, включающего и такие ЖК цепи различных биомембранных структур.

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

STRUCTURE, PROPERTIES, FUNCTIONS OF VERY LONG POLYENOIC FATTY ACIDS (MONTE CARLO COMPUTER SIMULATION STUDY)

A.L. Rabinovich, P.O. Ripatti

Institute of Biology, Karelian Research Centre, Russian Academy of Sciences, Petrozavodsk
rabinov@krc.karelia.ru

Monte Carlo computer simulations of very long polyunsaturated fatty acid chains $N:4(n-6)cis$, $N:4(n-3)cis$, $N:5(n-6)cis$, $N:5(n-3)cis$, $N:6(n-6)cis$, $N:6(n-3)cis$ have been carried out, where N is carbon atom number ($N=24,26,28,\dots,38$). The approach is applied to an investigation of the equilibrium flexibility and other properties of the fatty acid chains.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛИЗАЦИИ «ЖЕЛТКА» В СЕМЕННИКАХ МОРСКОЙ ЗВЕЗДЫ *PISASTER OCHRACEUS*

А.А. Реунов¹, Б.Д. Крафорд², Ю.А. Реунова¹

¹Институт биологии моря им. А.В. Жирмунского ДВО РАН, Владивосток, Россия
arkadiy_reunov@hotmail.com

²Университет Виктории, Отделение медицинских наук, Виктория, Канада
bcrawfor@uvic.ca

Механизмы питания гонад находятся в сфере внимания исследователей, изучающих степени подобия таких механизмов в различных таксонах с филогенетической точки зрения. Наибольшие успехи достигнуты в понимании питающих систем у морских ежей. Установлено, что у Echinoidea питающая субстанция, в англоязычной интерпретации называемая «МУР» (major yolk protein), формируется в перивисцеральном целоме и гемальной системе, а затем, как у самок так и у самцов, проникает через стенку гонад, накапливается во вспомогательных клетках (питающих фагоцитах), которые в свою очередь снабжают развивающиеся гаметы. Таким образом для морских ежей характерна физиологически универсальная система питания женских и мужских гонад.

Принципы питания гонад морских звезд были рассмотрены некоторыми исследователями для *Pisaster ochraceus*. Как это было показано для самок, эпитоп PY4F8, характерный для питающей субстанции, сравнимой с МУР морских ежей, присутствует в целомической жидкости и в желточных гранулах ооцитов, что указывает на экзогенное проникновение питательной субстанции в ооциты.