

УДК 577.352.3

ТЕРМОДИНАМИКА ЛИПИДНОЙ МЕМБРАНЫ С КРИВИЗНОЙ

© 2025 г. А. А. Дроздова^a

^aУниверситет науки и технологий НИТУ МИСИС, Москва, 119049 Россия
e-mail: annafonalex@gmail.com

Поступила в редакцию 17.09.2024

После доработки 05.02.2025

Принята к печати 06.02.2025

В работе рассмотрены поперечный изгиб поверхности бислойной липидной мембраны и профиль латерального давления в нейтральной части мембраны в рамках модели липидных молекул как гибких упругих цепей. При изменении формы мембраны может изменяться также профиль латерального давления. С помощью ренорм-группы была вычислена добавка к профилю латерального давления при поперечном изгибе мембранны. Рассчитаны модули наклона для нескольких видов липидов. Для монодельных мембран, состоящих из полимерных стержней, проведены расчеты модуля кручения и модуля Гаусса. Результаты расчетов сопоставлены с имеющимися данными экспериментов и молекулярной динамики.

Ключевые слова: липидная мембрана, профиль латерального давления, модуль Гаусса, модуль кручения, кривизна

DOI: 10.31857/S0233475525020051, **EDN:** UFQPVF

ВВЕДЕНИЕ

Физические свойства липидных мембран неоднородны по их толщине. Одной из важных характеристик липидного бислоя является профиль латерального давления, т.е. зависимость локального латерального давления от координаты z , перпендикулярной плоскости невозмущенной мембранны. При изменении формы мембранны, например при поперечном изгибе, изменяется также профиль латерального давления. Ранее автором [1] была получена добавка к профилю латерального давления за счет кривизны $\Pi_t^{(1)}(z, J)$. Данная величина была получена с помощью теории возмущений по малому параметру $L_0 J$, где L_0 – невозмущенная толщина монослоя, J – кривизна. Полученная формула для добавки к профилю латерального давления зависит от вариации площади, приходящейся на поверхности монослоя на липидную молекулу, $\delta A(z, J)$, где z – координата вдоль толщины монослоя. Также при получении добавки к профилю давления было учтено условие локальной объемной несжимаемости липидного материала при деформации изгиба: $AL = \text{const}$ (гидрофобный хвост липида занимает цилиндрический объем площадью поперечного сечения A длины L). В данной работе

был произведен уточняющий расчет и вычисление добавки к профилю латерального давления с помощью ренорм-группы.

Вычисленный профиль латерального давления качественно согласуется с профилем, полученным методом молекулярной динамики [2]. В работе [2] с помощью молекулярной динамики была показана 3D-картина изменения давления в везикуле. Авторы получили распределение $p_N(z)$ нормального давления по толщине мембранны, а именно $p_N(z) = p_r(z)$, где $p_r(z)$ – распределение давления в радиальных координатах, причем $p_N(z)$ мало по сравнению с $p_L(z)$, где $p_L(z)$ – латеральное давление. Также в работе [2] было определено, что профиль давления $\Delta P = p_L - p_N$; $\Delta P = \Pi_t(z)$ в обозначениях настоящей работы.

Стоит отметить, что вычисленный в данной работе профиль латерального давления согласуется с профилем $p_L(z)$, рассчитанным в работе [2], где также было показано, что $p_N(z) \rightarrow 0$ и $p_N(z) \ll p_L(z)$.

Другие характеристики, в частности модуль Гаусса и модуль кручения, будут вычисляться в предположении $p_N \gg p_L$. Дело в том, что эти деформации возникают лишь при изменении

толщины мембраны, и вариация толщины монослоя δL приводит к ненулевому нормальному давлению, вследствие чего обычно выполняется следующее условие: $p_N >> p_L$.

В дальнейшем предполагается вычислить модуль Гаусса, выразив его через p_N и p_L , как второй момент давления [3] (здесь $p_L(z)$ – латеральное давление в обозначениях работы [2]). Учитывая вклад в свободную энергию деформации кручения в форме Франка $\frac{1}{2}K_2(\mathbf{n} \cdot \text{rot}\mathbf{n})^2$, можно вычислить модуль кручения как второй момент нормального давления

$$K_{tw} = \int_0^{L_0} z^2 p_N(z) dz. \quad (1)$$

МЕТОДЫ

Как было сказано во введении, распределение нормального давления $p_N(z)$ для недеформированной мембранны приближено к нулю. А именно, для вывода формулы для $p_N(z)$ надо учесть выражение для свободной энергии (формула (6) в работе [1]) и выражение для вариации энтропийного коэффициента $\delta B(z)$ (формула (16) в [1]). При выводе выражения для $p_N(z)$ была

$$\frac{\delta F}{\delta L} = kT \sum_n \frac{R_n^{(0)2}(z)}{E_n^{(0)}} \left(\frac{\partial^2 B}{\partial L^2} \delta L + \frac{\partial B}{\partial L} + \frac{\partial^2 B}{\partial A \partial L} \delta A - \frac{\partial^2 B}{\partial L^2} \delta L \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}} - \frac{\partial B}{\partial L} \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}} - \frac{\partial^2 B}{\partial A \partial L} \delta A \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}} \right)$$

В полученном выражении выделим только слагаемые в первом порядке по кривизне (учитывая формулы (16) и (18) в [1]). После, дифференцируя еще раз по δL , получили вторую вариационную производную свободной энергии:

$$\frac{\delta^2 F}{\delta^2 L} = kT \sum_n \frac{R_n^{(0)2}(z)}{E_n^{(0)}} \frac{\partial^2 B}{\partial L^2} - kT \sum_n \frac{R_n^{(0)2}(z)}{E_n^{(0)2}} \left(\frac{\partial B}{\partial L} \right)^2.$$

В итоге выражение для профиля нормального давления имеет вид:

$$p_N(z) = \frac{kT}{L_0^2} \left(-\frac{\partial^2 B}{\partial^2 l} \sum_n \frac{R_n^{(0)2}(z)}{E_n^{(0)}} + \sum_n \frac{R_n^{(0)2}(z)}{E_n^{(0)2}} \left(\frac{\partial B}{\partial l} \right)^2 \right), \quad (2)$$

где было учтено $l = L/L_0$, l – относительное изменение толщины мембранны, а также k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура,

учтена свободная энергия деформированной мембранны $F = kT \sum_n \ln(E_n^{(0)} + E_n^{(1)}) + \text{const}$, а также $p_N(z) = -\frac{\delta^2 F}{\delta^2 L}(z)$. Сначала вычисляется первая вариационная производная свободной энергии по толщине монослоя (см. формулу (21) в [1]):

$$\frac{\delta F}{\delta L} = kT \sum_n \frac{R_n^{(0)2}(z)}{E_n^{(0)} + E_n^{(1)}} \left(\frac{\partial^2 B}{\partial L^2} \delta L + \frac{\partial B}{\partial L} + \frac{\partial^2 B}{\partial A \partial L} \delta A \right).$$

Далее надо разложить в ряд полученную дробь

$$\frac{1}{E_n^{(0)} + E_n^{(1)}} = \frac{1}{E_n^{(0)} \left(1 + \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}} \right)}$$

$\frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}}$ (для $E_n^{(1)}$ см. выражение (18) в [1]):

$$\frac{1}{E_n^{(0)} + E_n^{(1)}} = \frac{1}{E_n^{(0)}} \left(1 - \frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}} \right).$$

Теперь после подстановки полученного разложения в ряд в формулу для первой вариационной производной свободной энергии, можно получить:

$R_n^{(0)2}(z)$ – собственные функции размерности $[R_n^{(0)2}(z)] = \frac{1}{[L]}$, $E_n^{(0)}$, $E_n^{(1)}$ – собственные значения оператора энергии, учитывающего изгиб липидной цепи и энтропийное отталкивание между соседними цепями $E_n^{(0)} = \frac{K_f}{L_0^4} \cdot (b + c_n^4)$ [1]; суммирование ведется от $n = 1$ to ∞ , $b = L^4 B / K_f$ – безразмерный коэффициент, K_f – изгибная жесткость липидной цепи, B – коэффициент энтропийного отталкивания липидных цепей между собой, l – относительное изменение толщины мембранны, $l = L/L_0$. Можно записать формулу (2) в безразмерном виде для собственных значений и энтропийного потенциала (см. формулу (4) в [1] – выражение для c_n и собственных функций):

$$p_N(z) = \frac{kT}{L_0^2} \left(-\frac{\partial^2 b}{\partial^2 l} \sum_n \frac{R_n^{(0)2}(z)}{b + c_n^4} + \sum_n \frac{R_n^{(0)2}(z)}{(b + c_n^4)^2} \left(\frac{\partial b}{\partial l} \right)^2 \right).$$

Визуальная картина p_N приведена на рис. 1.

Далее подставим в формулу (1) формулу (2) и получим модуль кручения:

$$K_{tw} = \frac{kT}{L_0^2} \left\{ -\frac{\partial^2 B}{\partial l^2} \sum_n \frac{\int_0^{L_0} z^2 R_n^{(0)2}(z) dz}{E_n^{(0)}} + \right. \\ \left. + \left(\frac{\partial B}{\partial l} \right)^2 \sum_n \frac{\int_0^{L_0} z^2 R_n^{(0)2}(z) dz}{E_n^{(0)2}} \right\} \quad (3)$$

Здесь под интегралом стоит z^2 , если K_{tw} рассчитывается в случае бислойной мембраны, и z , если K_{tw} рассчитывается для одного верхнего монослоя мембранны.

Формулы для парциальных производных $\frac{\partial^2 b}{\partial l^2}$ и $\left(\frac{\partial b}{\partial l} \right)^2$ приведены в Приложении. Эти формулы описывают уточнение мембранны при деформации и, как следствие, ненулевой модуль кручения [4]. Дело в том, что в смектической мембране $\frac{\partial^2 b}{\partial l^2}$ и $\left(\frac{\partial b}{\partial l} \right)^2$ малы, что, согласно формуле (2),

должно приводить к малому нормальному давлению и, как следствие, нулевому модулю кручения — см. формулу (3).

Однако если происходит уменьшение толщины мембранны с коэффициентом уточнения $l = L/L_0$, тогда выполняется следующее условие для вычисления производных $B = \frac{K_f}{L^4} b$ (чтобы получить значения модуля кручения для смектика, нужно взять только или вторую производную b по l или первую производную b по l в формуле (3)):

$$\frac{\partial B}{\partial l} |_{L=L_0} = \frac{K_f}{L_0^5} \left(-4b + \frac{\partial b}{\partial l} \right), \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 B}{\partial l^2} |_{L=L_0} = \frac{K_f}{L_0^6} \left(-20b - 8 \frac{\partial b}{\partial l} + \frac{\partial^2 b}{\partial l^2} \right). \quad (5)$$

При растяжении в биополимерах может возникать деформация кручения. Эта идея подробно доказана в работе [5]. А именно, изменение толщины монослоя приводит к появлению кручения, хиральности и, как следствие, наклона. В работе [5] вычислены длины нескольких полимеров в случае кручения биополимера относительно его первоначального состояния. Получены величины модуля наклона $K_\theta = 0,031$ Н/м для

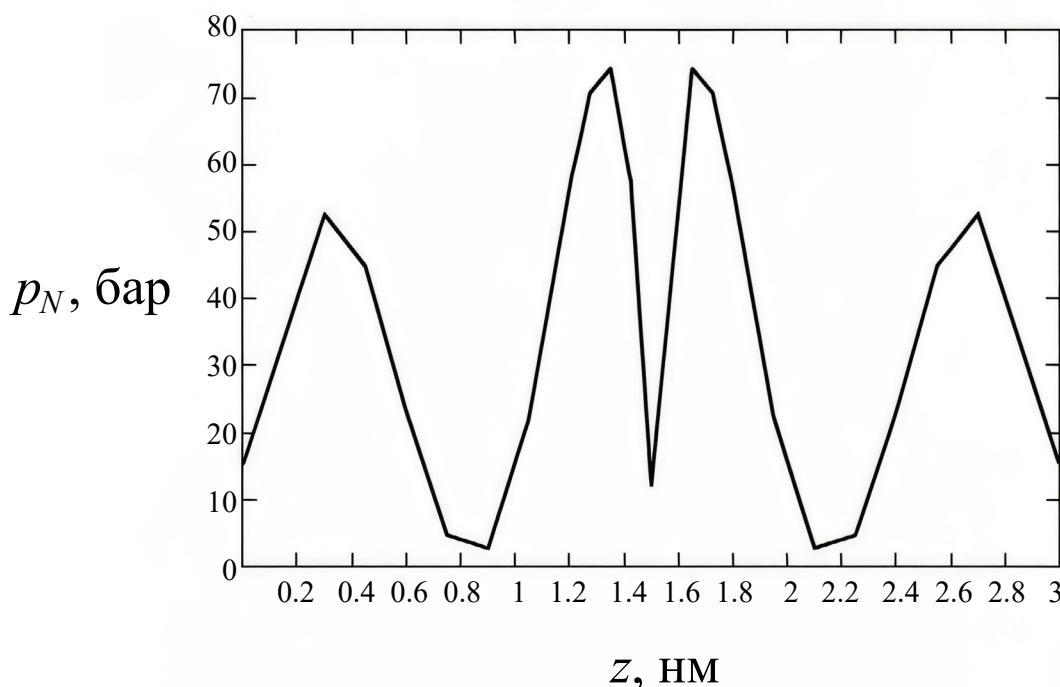


Рис. 1. Профиль нормального давления в мембране из DPPC с толщиной монослоя $L_0 = 1.5$ нм.

диарахидинилфосфатидилхолина (DAPC) (поверхностное натяжение в межслойной области $\gamma = 0.04 \text{ Н/м}$ и $T = 343\text{K}$). Для дипальмитоилфосфатидилхолина (DPPC) при поверхностном натяжении границы раздела вода—липидные хвосты $\gamma = 0.03 \text{ Н/м}$ и $T = 320\text{K}$ получено $K_\theta = 0.04 \text{ Н/м}$, что хорошо согласуется с работой [6]. Для дилаурилфосфатидилхолина (DLPC) получено $K_\theta = 0.060 \text{ Н/м}$, при $\gamma = 0.03 \text{ Н/м}$.

Далее рассмотрены некоторые аспекты, связанные с модулем Гаусса K_G .

Согласно теореме Гаусса—Боне, гауссова кривизна поверхности является топологическим инвариантом. Соответственно, гауссова кривизна дает постоянный вклад в энергию, если топология поверхности не изменяется. Однако изменение топологии сопровождается изменением энергии, связанной с гауссовой кривизной. Для вычисления этой энергии необходимо знать величину модуля Гаусса. Изменения топологии возникают вследствие нормальной и латеральной деформации, например при адресной доставке какого-либо вещества, в частности анестетика или лекарства, к клетке и внутрь клетки. Модули K_{tilt} (описывают деформацию изгиба в латеральном направлении) и K_{tw} появляются в топологии кручения. Здесь необходимо учесть, в каком направлении происходит деформация. Например, латеральное направление учтено через кручение K_{tw} . Продольный изгиб в мембранах не возникает вообще.

Необходимо отметить, что согласно [3] модуль Гаусса есть второй момент разницы профилей давления:

$$K_G = - \int_0^{L_0} z^2 (p_L(z) - p_N(z)) dz. \quad (6)$$

Подставим правую часть уравнения (1) в уравнение (6), получим

$$K_G = - \int_0^{L_0} z^2 p_L(z) dz + K_{tw}. \quad (7)$$

Расчеты по приведенным здесь формулам показали, что для твист-бэнд нематика, хирально-го смектика и холестерика выполняется условие $|p_N(z)| > |p_L(z)|$, тогда как для смектической бислойной мембранны $|p_N(z)| < |p_L(z)|$. В случае хирального смектика, твист-бэнд нематика и т.п. вместо липидов рассматривается мембрана из полимерных стержней (polymer rod) различной длины. Для таких мембран было получено, что $p_N \gg p_L$ и, соответственно, получается $K_G > 0$.

При изменении топологии, происходящем при делении мембран, гауссова энергия изменяется как

$$\Delta F_{fission} = -4\Delta K_G. \quad (8)$$

В этой формуле обозначена энергия новой фазы. Согласно (8) (при $K_G > 0$) и (5), образуются новые устойчивые фазы: твист-бэнд нематик, хиральный смектик, холестерик. Положительность модуля Гаусса для рассматриваемых мембран из полимерных стержней показана в работе [7].

В работе [8] получено отношение гауссово-го модуля и модуля поперечного изгиба $K: K_G = -0.3K$ из условия равновесия упругой со-ставляющей и энергии гидратации. Общая энер-гия есть равновесное значение энергии попереч-ного изгиба, гауссова энергия и энергия, связан-ная со спонтанной кривизной $\sim L_0 K_s$. В работе [9] получено другое отношение эластических кон-стант: $K_G/K = -1.04 \pm 0.03$ для липидного бислоя, а для монослоя $K_G(m)/K(m) = -0.98 \pm 0.09$. Дан-ные результаты были получены численно с по-мощью молекулярной динамики.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для DLPC, а точнее его аналога в мембра-не, состоящей из полимерных стержней такой же длины, что и молекулы DLPC, модуль Гаусса положителен и $K_G = 0.37K$.

Запишем также момент спонтанного изги-ба $K_{JJ} J_s = - \int_0^{L_0} z (p_L(z) - p_N(z)) dz$, где K_{JJ} модуль поперечного изгиба [3].

Первый основной результат данной работы (профиль давления) представлен в табл. 1. В ней показано распределение латерального давления в монослое мембранны из DLPC с заданной кри-визной $R = 31.4 \text{ нм}$. В ней z/L_0 — расстояние от гидрофильтрной области до центра бислоя, нор-мированное на толщину монослоя $L_0 = 1.1 \text{ нм}$.

Результаты, полученные в данной работе, со-гласуются с данными молекулярной динамики. Латеральное давление рассматривается во вну-тренней части бислойной мембранны (рис. 2). Кривизну и модули упругости удобно относить к нейтральной поверхности мембран — поверх-ности, на которой значение добавки к профилю латерального давления за счет кривизны рав-но нулю, т.е. не совершается работа по измене-нию латерального давления внутри мембранны.

Таблица 1. Данные для вычисленного профиля латерального давления $\Pi_t(z)$

z/L_0	$\Pi_t(z)$, кбар
0	0.11
0.1	0.18
0.2	0.31
0.3	0.41
0.4	0.16
0.5	0.3
0.6	0.21
0.7	0.3
0.8	0.33
0.9	0.13
1	0.3

Примечание. $\Pi_t(z) = \Pi_t^{(1)}(z, J) + \Pi_t^{(0)}(z)$, где $\Pi_t^{(0)}(z)$ – профиль латерального давления в плоской мембране без кривизны, $\Pi_t^{(1)}(z, J)$ – добавка к профилю латерального давления.

Положение нейтральной поверхности определяется условием равенства нулю модуля смешанной деформации растяжения-изгиба:

$$K_{AJ} = -\frac{\partial^2 F}{\partial A \partial J} = 0. \quad (9)$$

Латеральное давление также возможно отнести к поверхности монослоя. Обозначим P_t – латеральное давление, проинтегрированное по толщине монослоя. Тогда $P_t = -\frac{\partial F_t}{\partial A}$, где F_t – свободная энергия. При этом $p_L(z) = \Pi_t(z)$ – профиль латерального давления по толщине мембраны, и $P_t = \int_0^{L_0} \Pi_t(z) dz$. Распределение профи-

ля латерального давления представлено на рис. 2. При $z/L_0 = 0.3$ расположена нейтральная поверхность, наблюдается пик давления. При вычислении добавки к профилю латерального давления была учтена ренорм-группа: $\Pi_t^{(1)}(z, J) = \frac{kT}{A_\infty} \frac{R_{nt}^{(1)}(z)}{L_0}$.

Здесь J – кривизна, $R_{nt}^{(1)}(z)$ – первая поправка по теории возмущений, добавка к собственной

функции за счет кривизны в гидрофобной части бислоя, где t значит «hydrophobic tails» – область гидрофобных хвостов липидов, n – собственные функции.

Пик латерального давления указывает на положение нейтральной поверхности. Как было указано выше, на нейтральной поверхности не возникает латерального растяжения или сжатия $\frac{\partial^2 F}{\partial A \partial J} = 0$. Таким образом, нейтральная поверхность расположена не на поверхности раздела гидрофильная голова – гидрофобные хвосты, а ее положение совпадает с пиком давления $z/L_0 = 0.3$. В работе [10] было показано, что нейтральная поверхность не совпадает с границей раздела полярных головок и гидрофобных хвостов; она сдвинута от этой границы приблизительно на 0.1 нм вглубь монослоя.

Далее рассмотрение пика не учтено в работе [2]. В [2] авторы вычислили с помощью молекулярной динамики латеральное давление внутри везикулы с заданной кривизной. Получено несколько пиков на кривой латерального давления, что качественно совпадает с результатами этой работы. Однако положение нейтральной поверхности из графиков работы [2] не совпадает с рассчитанным здесь. При этом предсказываемое положение нейтральной поверхности в нашей работе $z/L_0 = 0.3$ согласуется с данными, полученными в работе [11].

Полученные в ходе расчетов в данной работе величины модулей упругости согласуются с известными из литературы. Например, K_θ , рассчитанное для DLPC, согласуется с данными работы [12], K_{tw} согласуется с [4]. Из проведенных расчетов получается что для DLPC $K_\theta = 0.059926$ Н/м ($L_0 = 1.1$ нм, $\gamma = 30$ мН/м), для DMPC $K_\theta = 0.046$ Н/м ($L_0 = 1.3$ нм, $\gamma = 30$ мН/м). Для сравнения, в работе [12] для DMPC получено $K_\theta = 43 \pm 2$ мН/м, для DPPC – $K_\theta = 44 \pm 16$ мН/м. Что касается модуля кручения K_{tw} , в работе [4] для DLPC было получено $K_{tw} = 0.2 \times 10^{-19}$ Дж. Для сравнения, величина K_{tw} , полученная здесь для DLPC, равна $K_{tw} = 2.42 \times 10^{-20}$ Дж.

Таким образом, теоретически рассчитанная величина модуля K_{tw} как второго момента нормального давления оказывается близка к величине, определенной в работе [4].

Значения модуля кручения K_{tw} не могут быть получены в программе для расчета термодинамических значений модуля изгиба Ribak Kartin. Детально модуль изгиба вычислен в [13]. Здесь необходимо привести формулы для K_{tw} . Модуль кручения K_{tw} в бислой-монослоиной системе эквивалентен $(2aB(z) - 2aB_1(z))$, где

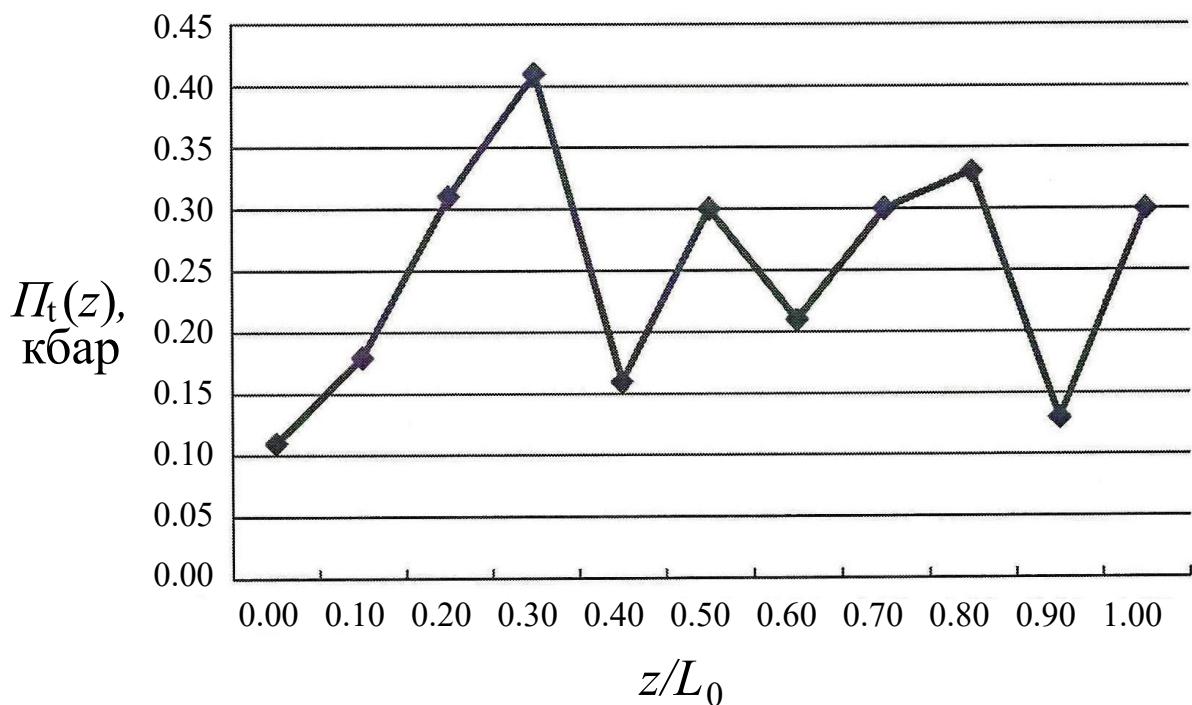


Рис. 2. Распределение латерального давления в мембране из DLPC с кривизной радиуса $R = 31.4$ нм, $J = 1/R$ – кривизна верхнего монослоя (см. табл. 1).

$B(z)$ – потенциал энергии энтропийного отталкивания липидных цепочек; $B_1(z)$ – распределение латерального давления из-за кривизны в продольных координатах изгиба. Эта формула сопоставима с формулой (3) с тем лишь отличием, что $B(z)$ – размерный потенциал, а функция $b(l)$, входящая в виде производной $\frac{\partial b}{\partial l}$, – безразмерна. Размерность $[B] = [\text{Дж} \times \text{м}/\text{м}^4] = [\text{Па}]$.

Как следует из формулы (3) и текста после нее, общие значения модуля кручения K_{tw} равны: $3.46 kT/\text{нм}$ DAPC, $3.91 kT/\text{нм}$ DMPC.

Подробности вычисления производной $\frac{\partial b}{\partial l}$, входящей в формулу (3), представлены в Приложении.

Приведенные значения модуля кручения ранее не рассчитывались и не измерялись.

Стоит здесь также привести оценки модуля кручения и изгиба для объемного нематика:

$$K_{JJ}J = L_0 J \int_0^{L_0} z p_N(z) dz = L_0^2 / 2 \cdot kT \cdot f(d2bl),$$

$$K_{tw} = \int_0^{L_0} z^2 p_N(z) dz = L_0^2 / 3 \cdot kT \cdot f(d2bl).$$

Таким образом, получается соотношение $K_{tw} = 2/3 K_{JJ}$.

Стоит отметить, что в большинстве задач не очень корректно рассматривать только $p_N(z)$, где N эквивалентно радиальным координатам $p_{rr}(z) = p_N(z)$ [2]: необходимо рассматривать также и $p_L(z)$. Например, в задаче о встраивании антимикробного пептида в мембрану клетки работа по встраиванию антимикробного пептида в мембрану равна

$$W = \int_0^L \Delta A(z) \cdot p_L(z) \cdot dz,$$

где $\Delta A(z)$ – изменение площади мембранны вследствие частичного встраивания амфипатического пептида; в это выражение входит латеральное давление $p_L(z)$. Однако моменты радиальных давлений в изогнутой мембране практически совпадают с профилем латерального давления в плоской мембране, в которой, согласно расчетам, $p_N(z)$ невелико. (см. рис. 1).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Параметр b – безразмерный энтропийный коэффициент – вычисляется из уравнения равновесия латерального давления и поверхностного натяжения границы раздела вода – липидные хвосты:

$$\frac{\partial F_t}{\partial A} = -\gamma, \quad (\text{П1})$$

где F_t – свободная энергия гидрофобной цепи (хвоста – “tails”) липида,

$$b = \frac{1}{v(\sqrt{a}-1)^2} + \frac{1}{4v^{4/3}(\sqrt{a}-1)^{8/3}}, \quad (\text{П2})$$

где $v = \frac{K_f A_0}{\pi k T L^3}$ – безразмерный коэффициент,

$$v = \frac{K_f A_0}{\pi k T L^3}. \quad (\text{П3})$$

Здесь K_f – изгибная жесткость липидной цепочки; $A_0 = 0.2 \text{ нм}^2$ – несжимаемая площадь липидной цепи; $= A/A_0$ безразмерная площадь, которая вычисляется из уравнения самосогласования:

$$\frac{\partial F_t}{\partial B} = L \langle R^2(z) \rangle. \quad (\text{П4})$$

Или в безразмерном виде:

$$\frac{3}{4b} + \frac{1}{2\sqrt{2}b^{3/4}} = v(\sqrt{a}-1)^2. \quad (\text{П5})$$

Дифференцирование уравнения (П5) с учетом (П3) дает первую производную b по l :

$$\frac{\partial b}{\partial l} = \frac{16b^2v(\sqrt{a}-1)^2}{4 + \sqrt{2}b^{1/4}}. \quad (\text{П5})$$

Аналогично вычисляется $\frac{\partial^2 b}{\partial l^2}$.

Конфликт интересов. Автор декларирует отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

Источники финансирования. При выполнении данной работы гранты не использовались.

Соответствие принципам этики. Настоящая статья не содержит описания каких-либо исследований с участием людей или животных в качестве объектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дроздова, А. А., Мухин, С. И. 2017. Профиль латерального давления в липидных мембранах с кривизной: аналитический расчет. *Журн. эксперим. и теорет. физики*, **152** (2), 416–422
2. Ollila O.H., Risselada H.J., Louhivuori M., Lindahl E., Vattulainen I., Marrink S.J. 2009. 3D pressure field in lipid membrane and membrane-protein complexes. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 078101.
3. Marsh D. 2007. Lateral pressure profile, spontaneous curvature frustration, and the incorporation and conformation of proteins in membranes. *Biophys. J.* **93**, 3884–3899.
4. Quint D.A., Gopinathan A., Grason G.M. 2016. Shape selection of surface-bound helical filaments: Biopolymers on curved membranes. *Biophys. J.* **111** (7), 1575–1585.
5. Gore J., Bryant Z., Nöllmann M., Le M.U., Cozzarelli N.R., Bustamante C. 2006. DNA overwinds when stretched. *Nature*. **442**, 836–839.
6. Hamm M., Kozlov M.M. 1998. Tilt model of inverted amphiphilic mesophases. *Eur. Phys. J. B–Condensed Matter and Complex Systems*, **6**, 519–528.
7. Gibaud T., Kaplan C.N., Sharma P., Zakhary M.J., Ward A., Oldenbourg R., Meyer R.B., Kamien R.D., Powers T.R., Dogic Z. 2017. Achiral symmetry breaking and positive Gaussian modulus lead to scalloped colloidal membranes. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. **114** (17), E3376–E3384.
8. Kozlovsky Y., Efrat A., Siegel D.A., Kozlov M.M. 2004. Stalk phase formation: Effects of dehydration and saddle splay modulus. *Biophys. J.* **87** (4), 2508–2521.
9. Hu M., de Jong D.H., Marrink S.J., Deserno M. 2013. Gaussian curvature elasticity determined from global shape transformations and local stress distributions: A comparative study using the MARTINI model. *Faraday Discussions*. **161**, 365–382.
10. Leikin S., Kozlov M.M., Fuller N.L., Rand R.P. 1996. Measured effects of diacylglycerol on structural and elastic properties of phospholipid membranes. *Biophys. J.* **71** (5), 2623–2632.
11. Helfrich W., Kozlov M.M. 1993. Bending tensions and the bending rigidity of fluid membranes. *J. Phys. II France*. **3**, 287–292.
12. Nagle J. 2017. Experimentally determined tilt and bending moduli of single-component lipid bilayers. *Chem. Phys. Lipids*. **205**, 18–24
13. Kheyfets B.B., Galimzyanov T.R., Drozdova A.A., Mukhin S.I. 2016. Analytical calculation of the lipid bilayer bending modulus. *Phys. Rev. E*. **94**, 042415.

Thermodynamics of a Lipid Membrane with Curvature

A. A. Drozdova¹

¹National University of Science and Technology "MISIS", Moscow, 119049 Russia

e-mail: annafonalex@gmail.com

In this paper, we consider the lateral bending of the membrane surface and the lateral pressure profile in the neutral part of the membrane (the neutral part is the part of the membrane where no work is done to change the pressure). They are chosen in such a way as to calculate the given law of curvature change. Next, the lateral pressure along the thickness of the curved membrane is obtained. Computing the pressure profile along the thickness of the monolayer involves some difficulties. The formulas for these and other characteristics such as spontaneous bending moment, Gauss modulus for different phases and torsional modulus $K_{tw} = K_2$ are given here. The formula for the lateral pressure profile in a membrane with curvature is obtained using the renormalization group.

Keywords: lipid membrane, lateral pressure profile, Gauss modulus, torsion modulus, curvature