

2. FÉLÉVI BESZÁMOLÓ

Papp Eszter (epapp95@gmail.com)

Statisztikus Fizika, Biológiai Fizika és Kvantumrendszerek Fizikája PhD program

Témavezető: Prof. Vattay Gábor

A dolgozat címe: Theory and Simulation of Anomalously High Conductance in Proteins

2021.06.18.

Kutatási tevékenység:

A fehérjék vezetőként viselkedésének^[1] magyarázata még mindig egy nyitott kérdés. A lokalizált molekulapályák és a kritikus energiaszint-statisztika^[2] arra a következtetésre ad okot, hogy ezekben a hosszú feltekeredett aminosav láncokban esetlegesen „szupravezető szigetek” is létrejöhetnek^[3]. Ebben az esetben kiindulhatunk a BCS elméletből, amelyből az alábbi egyszerűsített Hamilton operátort kapjuk és egy gap egyenletet az adott molekulapályán (Δ_i)^[4].

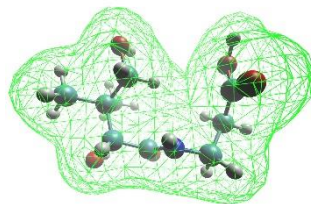
$$H = \sum_{i\sigma} (\epsilon_i - \epsilon_F) c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - g \sum_{ij} M_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}$$

$$M_{ij} = \int d^d \mathbf{r} |\psi_i(\mathbf{r})|^2 |\psi_j(\mathbf{r})|^2$$

$$\Delta_i = \frac{g}{2} \sum_k \frac{\Delta_k}{\sqrt{\Delta_k^2 + (\epsilon_k - \epsilon_F)^2}} M_{ki} \tanh \frac{\sqrt{\Delta_k^2 + (\epsilon_k - \epsilon_F)^2}}{2T}$$

Ahol ϵ_k jelöli az energiaszinteket, ϵ_F a Fermi energiát, g a csatolás erősségét, T a hőmérsékletet. Kritikus hőmérsékleten a gap eltűnik és megszűnnek a szupravezető állapotok. A legnagyobb kihívást az M mátrix kiszámolása jelenti. Ez kapcsolja össze a különböző energiaszinteket. Az általunk használt kvantumkémiai csomag (Yaehmop) kiterjesztett Hückel módszert alkalmaz, melyben Slater típusú pályák használatosak és ezeknek a szorzatainak integráljának elvégzése bonyolult.

Elsőként egy Monte Carlo típusú integrálást programoztam le, melyben *importance sampling*-et is alkalmaztam, a következőképpen: a molekula atomjait körbevettem “felfűjt” 2s pályákkal és az ebből kapott valószínűségi eloszlásból mintavételeztem az integrálási pontokat.



1. B5 vitamin körül kijelölt térfogat

Ez a módszer viszont nem bizonyult elég gyorsnak ahhoz, hogy fehérijék fentebb említett M mátrixát kiszámoljuk, ezért egy effektívebb módszert kellett keresnem.

Találtam egy Python csomagot, amely a Las Vegas és a Monte Carlo algoritmusokat ötvözi (*vegas*^[5]). Ezzel már kisebb molekulák (vitaminok) M mátrixát ki lehetett számolni, de párhuzamosítva és 30 magon futtatva is 6-16 órába telt. Ezzel egyértelművé vált, hogy más irányból kell megközelíteni a problémát, ezért elkezdtem keresni a szakirodalomban Slater típusú pályák integráljairól szóló cikkeket.

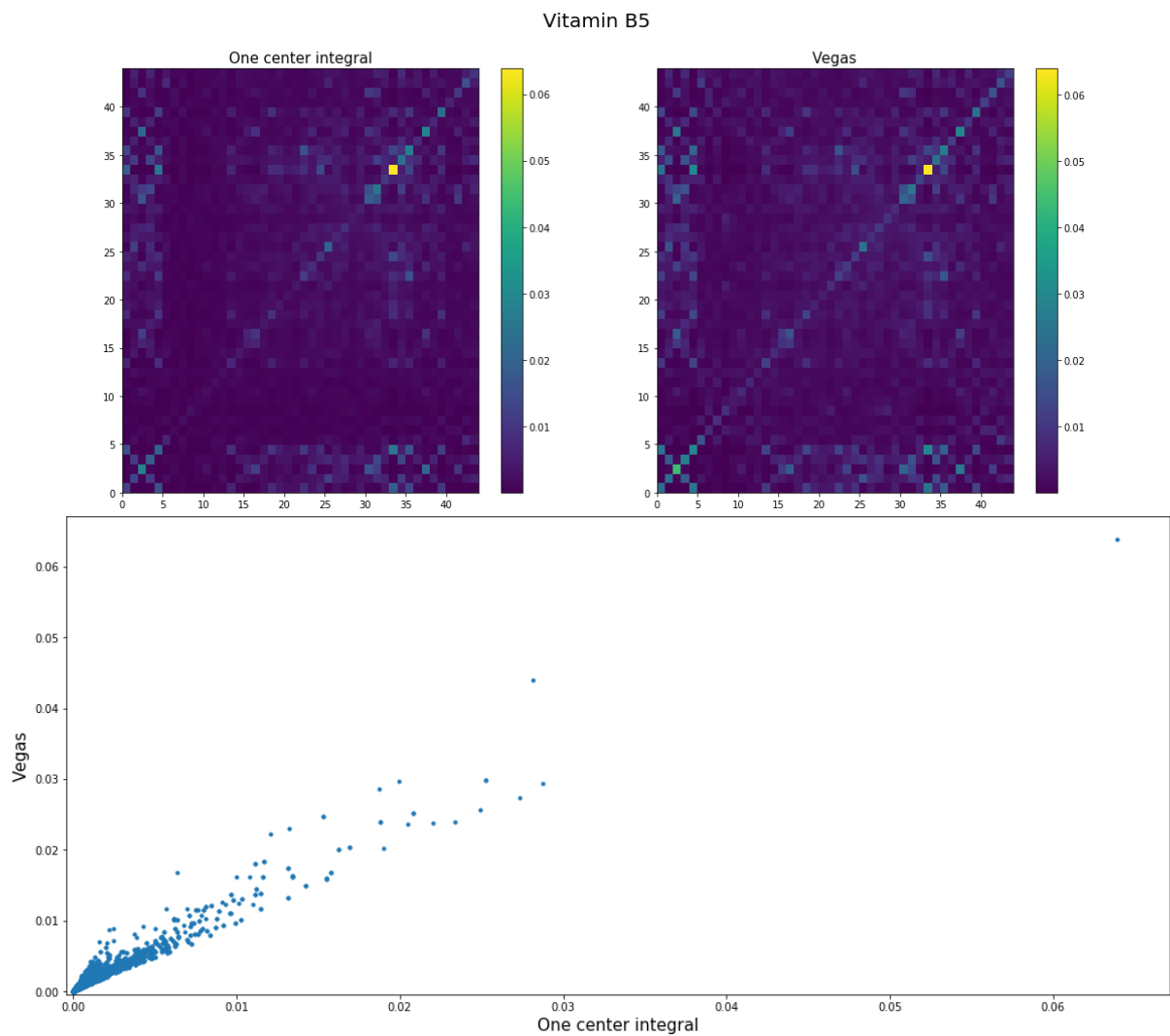
Lilian Berlu és Philip Hoggan cikke^[6] az olyan “molecular quantum similarity measurement”-ekhez kapcsolódó hasznos integrálokról íródott, melyeknél a kutatók Slater típusú pályákat használnak a molekulák leírására. A *quantum similarity measurement* arra hivatott, hogy megadja két molekula elektronsűrűségének a hasonlóságát. Ehhez a két molekulapálya négyzetének szorzatát kell kiintegrálni, ami szerencsénkre éppen egyezik az M mátrix elemeivel. Minden molekulapálya atomi pályák (1s, 2s, 2p, stb.) lineárkombinációja, így két molekulapálya négyzetének szorzata tulajdonképpen a következő tagok összegéből épül fel: négy atomi pálya szorzata megszorozva a hozzájuk tartozó négy konstans lineárkombinációs együtthatóval. A cikkben egyszerű képletet kapunk az egy centrumú integrálok elvégzésére, melyhez Gaunt együtthatók kiszámolása szükséges. Mivel az atomi pályák nem túl kiterjedtek és a molekulapályák is lokalizáltak fehérijék esetében, így az M mátrix elemeihez csak az egy centrumú integrálokat használjuk fel.

Tovább egyszerűsíti a számolást, ha figyelembe vesszük, hogy fehérijéket vizsgálunk, ugyanis a legtöbb fehérijében csak C, N, O, H és S atomok találhatók. Ezeknek maximum p pályáik lehetnek. A nem zérust adó integrálokban az atomi pályák kombinációi a következők:

- $ssss$ (1 db)
- $p_i p_i p_i p_i$ (3 db)
- $p_i p_i s s$ (18 db)
- $p_i p_i p_j p_j$ (36 db)

Ezeknek az atomi pálya szorzatoknak az integráljait analitikusan ki lehet számolni. Beszorozva a megfelelő együtthatókkal és összegezve a tagokat, megkapjuk az M mátrix egy centrumú integrálokkal közelített elemeit. A 2. ábrán láthatjuk, hogy az így közelített LUMO alatti molekulapályákhoz tartozó mátrixelemek (*One center integral*) nem sokban térnek el a *vegas* által kiszámoltaktól. LUMO felett már sokkal nagyobb a különbség a két módszer között, de a szupravezetés szempontjából számunka úgysis a betöltött pályák a fontosak.

Ezzel a közelítéssel élve a fehérijékre is belátható időn belül megkonstruálható az M mátrix, például a 6114 pályával bíró apomioglobinra a futási idő kb. 6 óra (párhuzamosítva, 30 magon futtatva). Ennek kiértékelése egyelőre folyamatban van.



2. M mátrix összehasonlítása

Tanulmányi tevékenység:

A félév során az alábbi kurzusokat végeztem el:

- Az érzékelés biofizikája II.: Bioakusztika (jeles)
- Nyitott kvantumrendszerek elméletei (jeles)

Oktatási tevékenység:

- Fizika II. (tárgykód: AMXFI2VBNE) előadás és gyakorlat az Óbudai Egyetem Alba Regia Műszaki Karán másodéves villamosmérnök hallgatóknak. (heti 2+1 óra)
- Fizika numerikus módszerei II. (tárgykód: fiznum2f191a): konzultálás a diákokkal a beadandókkal kapcsolatban; majd a beadandók értékelése, átbeszélése.

Szakmai közéleti tevékenység:

- Kísérletek bemutatása az Atomcsillen online
- 5 ELTE TTK podcast felvételen való részvétel, mint riporter

Publikációk:

Folyamatban van egy közös cikk írása az előző beszámolóban említett két kutatócsoporttal.

Hivatkozások:

- [1] Zhang, Bintian et al. 2017. "Observation of Giant Conductance Fluctuations in a Protein." Nano Futures 1(3):035002.
- [2] Gabor Vattay, Dennis Salahub, Istvan Csabai, Ali Nassimi, and Stuart A. Kaufmann. 2015. "Quantum Criticality at the Origin of Life." Retrieved May 12, 2018 (<http://arxiv.org/abs/1502.06880>).
- [3] Feigel'Man MV, Ioffe LB, Kravtsov VE, Cuevas E. „Fractal superconductivity near localization threshold” Annals of Physics. 2010 Jul 1;325(7):1390-478.
- [4] Ghosal A, Randeria M, Trivedi N. „Inhomogeneous pairing in highly disordered s-wave superconductors.” Physical Review B. 2001 Nov 29;65(1):014501.
- [5] <https://vegas.readthedocs.io/en/latest/tutorial.html>
- [6] Berlu, Lilian and Philip Hoggan. 2003. “ Useful Integrals for Ab-Initio Molecular Quantum Similarity Measurements Using Slater Type Atomic Orbitals .” Journal of Theoretical and Computational Chemistry 02(02):147–61.