

Όνοματεπώνυμο	Κωνσταντίνος Λαμπρόπουλος
Τίτλος εργασίας	<i>Μεταφορά φορτίου σε περιοδικά τμήματα DNA: περιγραφή ισχυρής δέσμησης σε επίπεδο ζευγών βάσεων και σε επίπεδο βάσεων</i>
Επιβλέπων Καθηγητής	Κ. Σιμσερίδης, Επίκουρος Καθηγητής
Περίληψη	<p>Εφαρμόζονται δυο προσεγγίσεις Ισχυρής Δέσμησης (Tight-Binding) για την περιγραφή της μεταφοράς ενός επιπλέον φορτίου (οπής ή ηλεκτρονίου) σε ορισμένα περιοδικά τμήματα B-DNA που αποτελούνται από N ζεύγη βάσεων: (I) σε επίπεδο ζευγών βάσεων, χρησιμοποιώντας τις επιτόπιες ενέργειες των ζευγών βάσεων και τα ολοκληρώματα μεταπήδησης μεταξύ διαδοχικών ζευγών βάσεων και (II) σε επίπεδο βάσεων, χρησιμοποιώντας τις επιτόπιες ενέργειες των βάσεων και τα ολοκληρώματα μεταπήδησης μεταξύ γειτονικών βάσεων, δηλαδή μεταξύ (α) διαδοχικών βάσεων του ίδιου κλώνου, (β) συμπληρωματικών βάσεων που ορίζουν ένα ζεύγος βάσεων και (γ) διαγώνια τοποθετημένων βάσεων δυο διαδοχικών ζευγών. Υποθέτουμε ότι μια επιπλέον οπή (ηλεκτρόνιο) μεταφέρεται μέσω των τροχιακών HOMO (LUMO) των ζευγών βάσεων (I) ή των βάσεων (II). Οι παράμετροι Ισχυρής Δέσμησης λαμβάνονται από τη βιβλιογραφία και χρησιμοποιούνται για την επίλυση ενός συστήματος MD συζευγμένων εξισώσεων [$MD = N$ (I), $MD = 2N$ (II)] για το χρονοανεξάρτητο πρόβλημα και ενός συστήματος MD συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων 1^{ης} τάξης για το χρονοεξαρτώμενο πρόβλημα. Επιλύουμε τα συστήματα αυτά για τρεις κατηγορίες περιοδικών τμημάτων B-DNA, οι οποίες ορίζονται από τον τρόπο με τον οποίο δομείται η αλληλουχία των ζευγών βάσεων. Για καθεμιά από τις κατηγορίες αυτές, μελετώνται τα HOMO/LUMO φάσματα ιδιοτιμών (ιδιοφάσματα), καθώς και οι HOMO/LUMO πυκνότητες καταστάσεων (DOS). Εν συνεχεία, υπολογίζονται οι μέσες (χρονικά) πιθανότητες εύρεσης του επιπλέον φορέα σε κάθε θέση [ζεύγος βάσεων (I) ή βάση (II)] ενός δεδομένου τμήματος, τα φάσματα Fourier, τα οποία αντανακλούν το συχνοτικό περιεχόμενο της μεταφοράς του φορέα, καθώς και οι καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταφοράς του επιπλέον φορέα από μια θέση σε μια άλλη k_{ji}. Συζητούνται τα αποτελέσματα και τα συμπεράσματα που προκύπτουν για καθεμιά από τις κατηγορίες τμημάτων στα πλαίσια των δυο προσεγγίσεων. Η σύγκριση των προσεγγίσεων οδηγεί στην κατανόηση συμπληρωματικών πτυχών της μεταφοράς φορτίου διαμέσου του DNA.</p>
Λέξεις κλειδιά	DNA, μεταφορά φορτίου σε βιολογικά συστήματα, πολυμερή, πρότυπο ισχυρής δέσμησης
Τριμελής επιτροπή	Κ. Σιμσερίδης, Επίκουρος Καθηγητής Γ. Π. Τριμπέρης, Καθηγητής Β. Λυκοδήμος, Επίκουρος Καθηγητής