

Όνοματεπώνυμο	Μαριλένα Μαντέλα
Τίτλος εργασίας	<i>Μεταβίβαση φορτίου σε απεριοδικά τμήματα B-DNA: περιγραφή Ισχυρής Δέσμησης σε επίπεδο ζευγών βάσεων</i>
Επιβλέπων Καθηγητής	Κωνσταντίνος Σιμσερίδης, Επίκουρος Καθηγητής
Περίληψη	<p>Η παρούσα διπλωματική εργασία έχει ως θέμα τη μεταβίβαση φορτίου σε απεριοδικά πολυμερή τμήματα B-DNA. Θεμελιώνεται θεωρητικά το Πρότυπο της Ισχυρής Δέσμησης (Tight-Binding Model) και εφαρμόζεται στην περιγραφή της μεταβίβασης φορτίου στο B-DNA σε επίπεδο ζευγών βάσεων. Εξετάζεται η συμπεριφορά ενός επιπλέον φορέα (ηλεκτρονίου ή οπής) όταν τοποθετηθεί σε ένα μονομερές, δηλαδή σε ένα ζεύγος βάσεων, και μελετάται η μεταβίβασή του σε όλο το μήκος του πολυμερούς, χρησιμοποιώντας χαρακτηριστικά όπως οι επιτόπιες ενέργειες του φορέα σε κάθε ζεύγος βάσεων και οι παράμετροι μεταπήδησης του φορέα από ένα ζεύγος βάσεων στα αμέσως γειτονικά του. Αναλύονται και σχολιάζονται ορισμένα χαρακτηριστικά μεγέθη που έχουν προκύψει από την Εφαρμογή του Προτύπου Ισχυρής Δέσμησης σε οιονεί περιοδικές (Fibonacci, Thue-Morse, Double-Period, Rudin-Shapiro) και μορφοκλασματικές (Cantor Dust, Asymmetric Cantor Set) ακολουθίες μονομερών. Τα μεγέθη αυτά είναι τα ιδιοφάσματα των HOMO και LUMO καταστάσεων, οι πυκνότητες καταστάσεων, οι μέσες χρονικά πιθανότητες εύρεσης του φορέα σε κάποιο συγκεκριμένο μονομερές, το συχνотικό περιεχόμενο (φάσματα Fourier) της μεταβιβάσεως του επιπλέον φορέα, καθώς και ο καθαρός μέσος ρυθμός μεταβιβάσεώς του. Τέλος, η παραπάνω ανάλυση εφαρμόζεται για τον υπολογισμό των καθαρών μέσων ρυθμών μεταβιβάσεως ορισμένων ακολουθιών που έχουν χρησιμοποιηθεί σε πειράματα και τα αποτελέσματα συγκρίνονται με τις αντίστοιχες τιμές της βιβλιογραφίας.</p>
Λέξεις κλειδιά	DNA, μεταβίβαση φορτίου, απεριοδικές δομές, πρότυπο ισχυρής δέσμησης
Τριμελής επιτροπή	Κωνσταντίνος Σιμσερίδης, Επίκουρος Καθηγητής Σπυρίδων Γαρδέλης, Αναπληρωτής Καθηγητής Σπυρίδων Γλένης, Επίκουρος Καθηγητής