

Όνοματεπώνυμο	Χαράλαμπος Μαρούλης
Τίτλος εργασίας	<i>Μεταφορά φορτίου σε μονοδιάστατα περιοδικά τμήματα DNA: περιγραφή ισχυρής δέσμησης σε επίπεδο ζευγών βάσεων</i>
Επιβλέπων Καθηγητής	Κ. Σιμσερίδης, Επίκουρος Καθηγητής
Περίληψη	<p>Μελετάται η μεταφορά φορτίου (οπής ή ηλεκτρονίου) σε ορισμένα περιοδικά τμήματα B-DNA που αποτελούνται από N ζεύγη βάσεων. Εφαρμόζεται η προσέγγιση της Ισχυρής Δέσμησης (Tight-Binding) σε επίπεδο ζευγών βάσεων, χρησιμοποιώντας τις επιτόπιες ενέργειες των ζευγών βάσεων και τις παραμέτρους μεταπήδησης μεταξύ διαδοχικών ζευγών βάσεων. Υποθέτουμε ότι ένας επιπλέον φορέας (οπή ή ηλεκτρόνιο) μεταφέρεται μέσω των τροχιακών HOMO ή LUMO των ζευγών βάσεων. Αρχικά, μελετάται το χρονοανεξάρτητο πρόβλημα επιλύοντας ένα σύστημα N συζευγμένων εξισώσεων και στη συνέχεια μελετάται το χρονοεξαρτημένο πρόβλημα επιλύοντας ένα σύστημα N συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης. Οι παράμετροι Ισχυρής Δέσμησης που χρησιμοποιούνται για να επιλυθούν τα ανωτέρω προβλήματα λαμβάνονται από τη βιβλιογραφία. Μελετώνται τρεις τύποι περιοδικών τμημάτων B-DNA που ορίζονται με βάση τον τρόπο που δομείται η αλληλουχία των ζευγών βάσεων κάθε φορά. Έτσι, έχουμε τους τύπους α', β' και γ', για κάθε έναν από αυτούς μελετώνται τα HOMO/LUMO ενεργειακά ιδιοφάσματα και οι πυκνότητες καταστάσεων (DOS). Ακολουθώντας, υπολογίζονται οι μέσες χρονικά πιθανότητες εύρεσης του επιπλέον φορέα σε κάθε θέση (ζεύγος βάσεων) ενός δεδομένου τμήματος, τα φάσματα Fourier καθώς και άλλα χαρακτηριστικά μεγέθη μεταφοράς όπως οι καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταφοράς. Τέλος, εξάγονται γενικά συμπεράσματα για την μεταφορά φορτίου στους παραπάνω τρεις τύπους πολυμερών B-DNA.</p>
Λέξεις κλειδιά	DNA, ισχυρή δέσμηση, ζεύγος βάσεων, μεταφορά φορτίου, περιοδικά πολυμερή B-DNA
Τριμελής επιτροπή	Κ. Σιμσερίδης, Επίκουρος Καθηγητής Ι. Χατζηαγαπίου, Αναπληρωτής Καθηγητής Ι. Λελίδης, Επίκουρος Καθηγητής