

**Τίτλος** Ηλεκτρονική δομή και μεταβίβαση οπής σε πολυμερή B-DNA με το πρότυπο Ισχυρής Δεσμεύσεως Σύρματος - Ψαροκόκαλου. Electronic Structure and Hole Transfer in B-DNA polymers, via the Fishbone - Wire Tight Binding Model.

### Περίληψη

Θα χρησιμοποιήσουμε το πρότυπο Ισχυρής Δεσμεύσεως Σύρματος - Ψαροκόκαλου για να μελετήσουμε την ηλεκτρονική δομή και τη συνεκτική μεταβίβαση μιας οπής (οπή = απουσία ηλεκτρονίου λόγω οξειδώσεως) σε διαφόρων τύπων πολυμερή B-DNA. Οι θέσεις όπου μπορεί να βρίσκεται ο φορέας είναι τα ζεύγη βάσεων αλλά και οι συνδεδεμένες με αυτά δεοξυριβόζες. Ομοπολυμερή (π.χ. G...) και όλα τα δυνατά διμερή, απουσία αταξίας στις επιτόπιες ενέργειες των δεοξυριβοζών, έχουν ήδη μελετηθεί [C. Simserides, A. Orfanaki, N. Margariti, K. Lambropoulos, Electronic Structure and Hole Transfer of All B-DNA Dimers and Homopolymers, via the Fishbone - Wire Model. Materials 2023, 16, 3200. <https://doi.org/10.3390/ma16083200>].

Τώρα θα μελετήσουμε

- (α) άλλους τύπους πολυμερών, όπως π.χ. περιοδικά GC..., GA...,
- (β) πολυμερή με γέφυρες, όπως π.χ. G(A)<sub>n</sub>G,
- (γ) πολυμερή με αταξία στις επιτόπιες ενέργειες των δεοξυριβοζών.

Για το χρονοανεξάρτητο πρόβλημα, θα υπολογίσουμε ιδιοενέργειες και πυκνότητα καταστάσεων. Για το χρονοεξαρτημένο πρόβλημα μετά από μία οξείδωση (δηλαδή, δημιουργία μιας οπής είτε σε ζεύγος βάσεων είτε σε δεοξυριβόζη), θα υπολογίσουμε τις μέσες χρονικά πιθανότητες παρουσίας της οπής σε κάθε θέση, τους μέσους ρυθμούς μεταβιβάσεως και το συχνοτικό περιεχόμενο της μεταβιβάσεως ως προς το φορτίο και τη διπολική ροπή.

Η μελέτη είναι αναλυτική (δηλαδή εξισώσεις) και αριθμητική (δηλαδή προγραμματισμός).

### Keywords

B-DNA; polymer; oxidation; hole; deoxyribose; base pair; transfer; Fishbone-Wire; Tight Binding

### Προαπαιτούμενες γνώσεις

- Καλή γνώση Κβαντικής Μηχανικής I και II. Επίλυση διαφορικών εξισώσεων με τη μέθοδο ιδιοτιμών - ιδιοανυσμάτων, όπως π.χ. στο μάθημα της Κβαντικής Οπτικής.
- Αγγλική γλώσσα σε επίπεδο αναγνώσεως επιστημονικών κειμένων.

### Επιθυμητές γνώσεις

- Προγραμματισμός σε γλώσσα matlab. Θα μάθουμε μαζί matlab, πάντως.

### Μαθησιακά αποτελέσματα

- Εξοικείωση με την έρευνα και τη συγγραφή επιστημονικών κειμένων.
- Επεξεργασία κειμένου (μπορείτε να μάθετε και Latex επί τη ευκαιρία).
- Συνδυασμός αναλυτικής και αριθμητικής αντιμετώπισης προβλημάτων.  
Πώς η αναλυτική λύση ελέγχει την αριθμητική και αντιστρόφως.
- Απόκτηση προγραμματιστικών δεξιοτήτων σε matlab.
- Χρήση Jmol, Origin, Latex.

### Υπεύθυνος Καθηγητής

- Κωνσταντίνος Σιμσερίδης
- csimseri@phys.uoa.gr