



ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ ΣΤΕΡΕΑΣ ΚΑΤΑΣΤΑΣΗΣ

Ημερίδα Υποψήφιων Διδακτόρων 2019

**Ενεργειακή δομή και μεταβίβαση
φορτίου σε οιονεί περιοδικά και
μορφοκλασματικά τμήματα DNA**

Μαριλένα Μαντέλα

Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή
2. Το Πρότυπο της Ισχυρής δέσμευσης: περιγραφή σε επίπεδο ζευγών βάσεων
3. Αποτελέσματα για οιονεί περιοδικά και μορφοκλασματικά πολυμερή
4. Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα
5. Συμπεράσματα

Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή
2. Το Πρότυπο της Ισχυρής δέσμευσης: περιγραφή σε επίπεδο ζευγών βάσεων
3. Αποτελέσματα για οιονεί περιοδικά και μορφοκλασματικά πολυμερή
4. Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα
5. Συμπεράσματα

Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή
2. Το Πρότυπο της Ισχυρής δέσμευσης: περιγραφή σε επίπεδο ζευγών βάσεων
3. Αποτελέσματα για οιονεί περιοδικά και μορφοκλασματικά πολυμερή
4. Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα
5. Συμπεράσματα

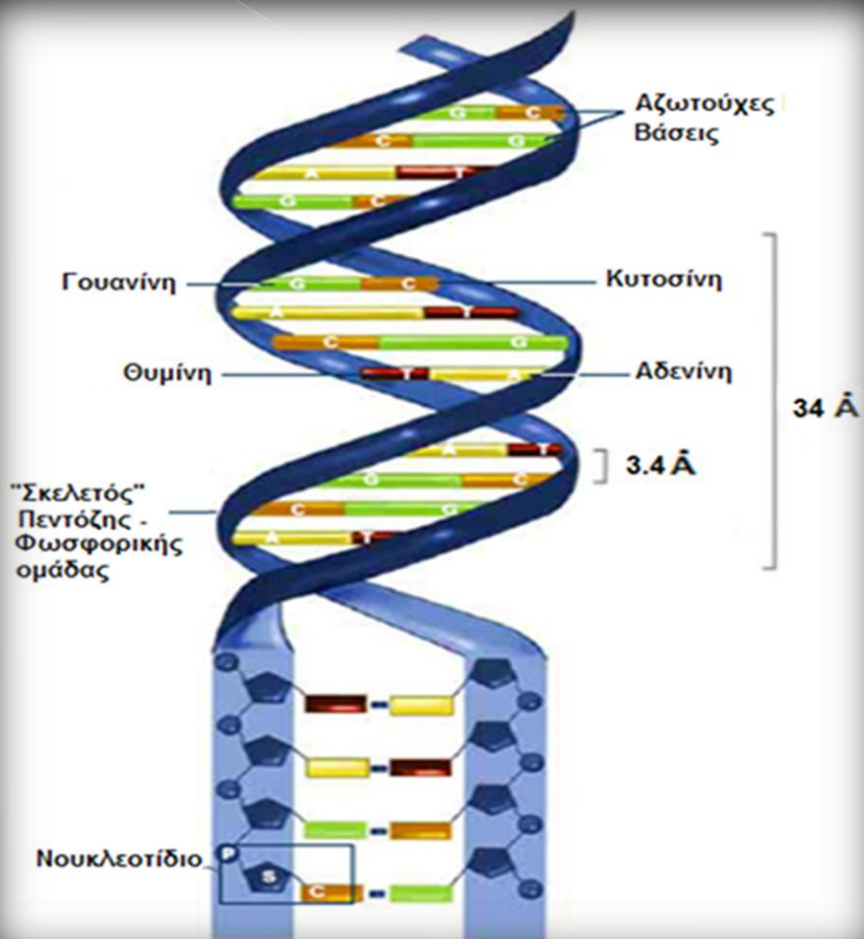
Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή
2. Το Πρότυπο της Ισχυρής δέσμησης: περιγραφή σε επίπεδο ζευγών βάσεων
3. Αποτελέσματα για οιονεί περιοδικά και μορφοκλασματικά πολυμερή
4. Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα
5. Συμπεράσματα

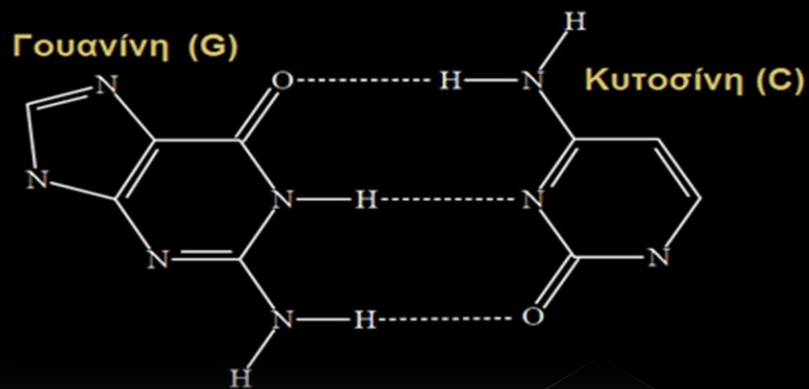
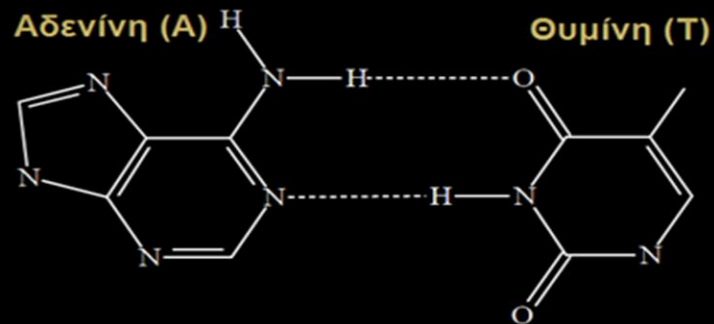
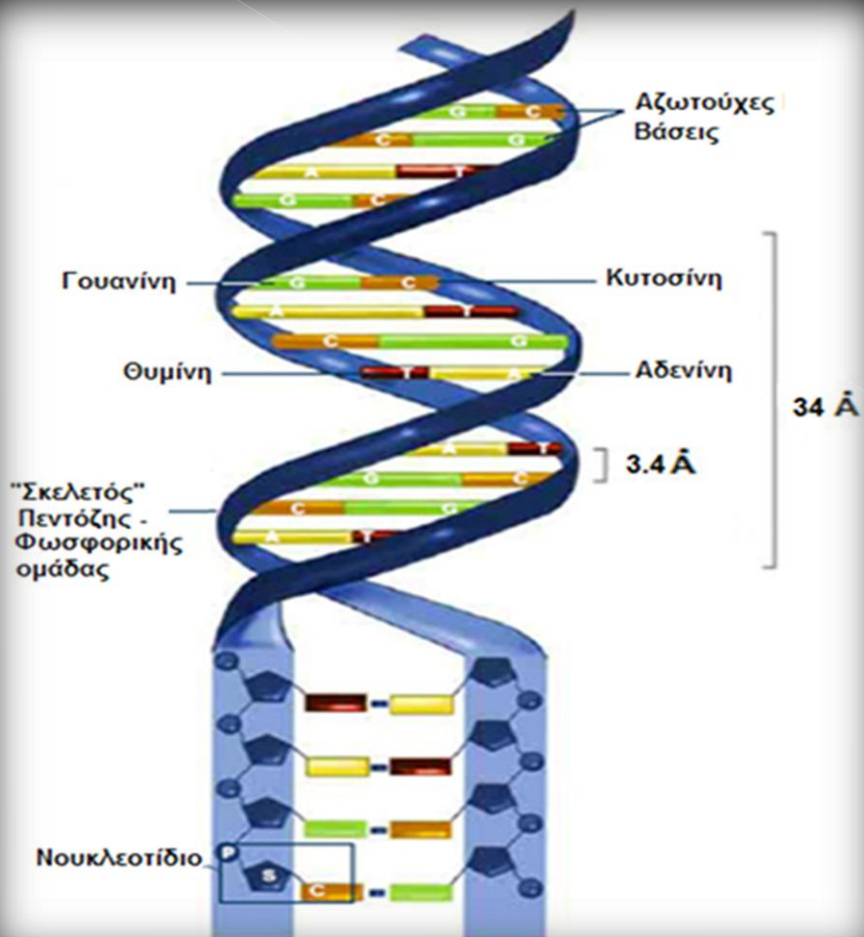
Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή
2. Το Πρότυπο της Ισχυρής δέσμευσης: περιγραφή σε επίπεδο ζευγών βάσεων
3. Αποτελέσματα για οιονεί περιοδικά και μορφοκλασματικά πολυμερή
4. Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα
5. Συμπεράσματα

Η δομή του B-DNA



Η δομή του B-DNA



Το Πρότυπο της Ισχυρής Δέσμευσης

- Διάφορα πρότυπα μεταβίβασης φορτίου:
πρότυπο σύρματος, πρότυπο κλίμακας, εκτεταμένο
πρότυπο κλίμακας, πρότυπο «ψαροκόκαλου» ...

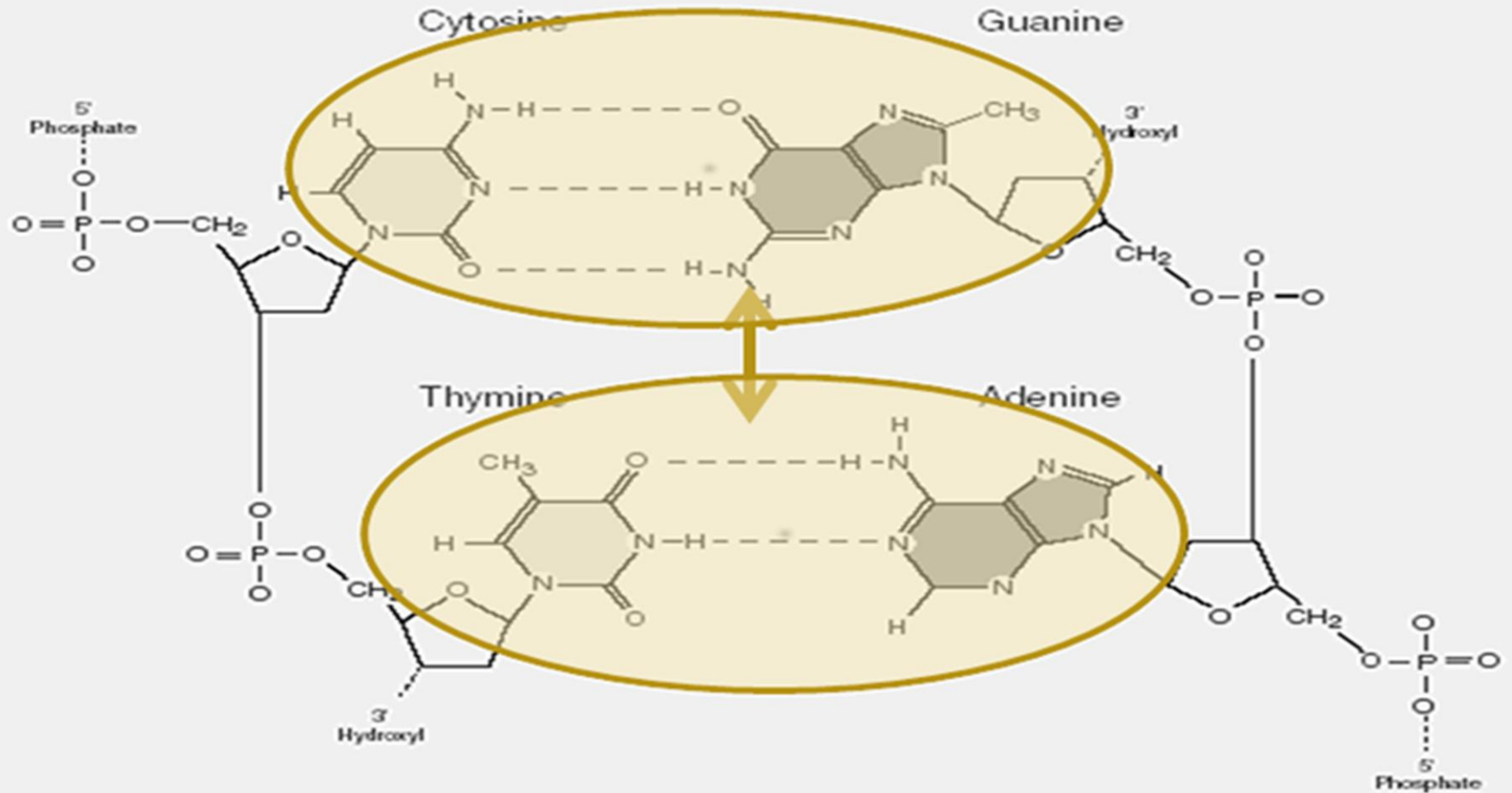
Το Πρότυπο της Ισχυρής Δέσμευσης

- Διάφορα πρότυπα μεταβίβασης φορτίου:
πρότυπο σύρματος, πρότυπο κλίμακας, εκτεταμένο πρότυπο κλίμακας, πρότυπο «ψαροκόκαλου» ...

Πρότυπο Σύρματος (Wire Model)

- Περιγραφή σε επίπεδο ζευγών βάσεων
- Μια επιπλέον οπή ή ηλεκτρόνιο μεταφέρεται μέσω της αλληλεπικάλυψης των π μοριακών τροχιακών των ζευγών βάσεων (HOMO για τις οπές, LUMO για τα ηλεκτρόνια).

Το Πρότυπο της Ισχυρής Δέσμευσης



Το Πρότυπο της Ισχυρής Δέσμευσης

- Διάφορα πρότυπα μεταβίβασης φορτίου:
πρότυπο σύρματος, πρότυπο κλίμακας, εκτεταμένο πρότυπο κλίμακας, πρότυπο «ψαροκόκαλου» ...

Πρότυπο Σύρματος (Wire Model)

- Περιγραφή σε επίπεδο ζευγών βάσεων
- Μια επιπλέον οπή ή ηλεκτρόνιο μεταφέρεται μέσω της αλληλεπικάλυψης των π μοριακών τροχιακών των ζευγών βάσεων (HOMO για τις οπές, LUMO για τα ηλεκτρόνια).

Το Πρότυπο της Ισχυρής Δέσμευσης

- Διάφορα πρότυπα μεταβίβασης φορτίου:
πρότυπο σύρματος, πρότυπο κλίμακας, εκτεταμένο πρότυπο κλίμακας, πρότυπο «ψαροκόκαλου» ...

Πρότυπο Σύρματος (Wire Model)

- Περιγραφή σε επίπεδο ζευγών βάσεων
- Μια επιπλέον οπή ή ηλεκτρόνιο μεταφέρεται μέσω της αλληλεπικάλυψης των π μοριακών τροχιακών των ζευγών βάσεων (HOMO για τις οπές, LUMO για τα ηλεκτρόνια).
- **Επιτόπιες ενέργειες** των HOMO/LUMO τροχιακών των ζ.β.
- **Ολοκληρώματα μεταβιβάσεως** μεταξύ των HOMO ή LUMO τροχιακών, γειτονικών ζ.β.

Επίλυση του Προτύπου

$$\hat{H}^{DNA} = \sum_{\mu=1}^N E_{H/L}^{bp\mu} |\mu\rangle \langle \mu| + \sum_{\mu=1}^{N-1} t_{H/L}^{bp\mu, \mu+1} |\mu\rangle \langle \mu + 1| + h.c.$$

$E_{H/L}^{bp\mu}$: επιτόπια ενέργεια H/L του μ -οστού ζ.β.

$t_{H/L}^{bp\mu, \mu'}$: ολοκληρώματα μεταβιβάσεως

Επίλυση του Προτύπου

$$\hat{H}^{DNA} = \sum_{\mu=1}^N E_{H/L}^{bp\mu} |\mu\rangle \langle \mu| + \sum_{\mu=1}^{N-1} t_{H/L}^{bp\mu,\mu+1} |\mu\rangle \langle \mu + 1| + h.c.$$

Χρονοανεξάρτητο Πρόβλημα

Χρονοεξαρτώμενο Πρόβλημα

$E_{H/L}^{bp\mu}$: επιτόπια ενέργεια H/L του μ -οστού ζ.β.

$t_{H/L}^{bp\mu,\mu'}$: ολοκληρώματα μεταβιβάσεως

Επίλυση του Προτύπου

$$\hat{H}^{DNA} = \sum_{\mu=1}^N E_{H/L}^{bp\mu} |\mu\rangle \langle \mu| + \sum_{\mu=1}^{N-1} t_{H/L}^{bp\mu, \mu+1} |\mu\rangle \langle \mu+1| + h.c.$$

Χρονοανεξάρτητο Πρόβλημα

$$|DNA\rangle = \sum_{\mu=1}^N \Gamma_{\mu} |\mu\rangle$$

Χρονοεξαρτώμενο Πρόβλημα

$$|DNA(t)\rangle = \sum_{\mu=1}^N A_{\mu}(t) |\mu\rangle$$

$E_{H/L}^{bp\mu}$: επιτόπια ενέργεια H/L του μ -οστού ζ.β.

$t_{H/L}^{bp\mu, \mu'}$: ολοκληρώματα μεταβιβάσεως

Επίλυση του Προτύπου

$$\hat{H}^{DNA} = \sum_{\mu=1}^N E_{H/L}^{bp\mu} |\mu\rangle \langle \mu| + \sum_{\mu=1}^{N-1} t_{H/L}^{bp\mu, \mu+1} |\mu\rangle \langle \mu+1| + h.c.$$

Χρονοανεξάρτητο Πρόβλημα

$$|DNA\rangle = \sum_{\mu=1}^N \Gamma_{\mu} |\mu\rangle$$

$$E\Gamma_{\mu} = E_{H/L}^{bp\mu} \Gamma_{\mu} + t_{H/L}^{bp\mu, \mu-1} \Gamma_{\mu-1} + t_{H/L}^{bp\mu, \mu+1} \Gamma_{\mu+1}$$

$$E_{H/L}^{bp\mu}$$

: επιτόπια ενέργεια H/L του μ -οστού ζ.β.

$$t_{H/L}^{bp\mu, \mu'}$$

: ολοκληρώματα μεταβιβάσεως

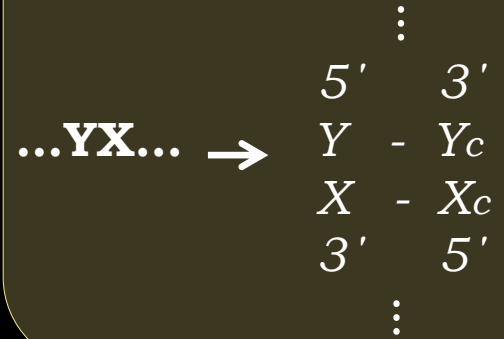
Χρονοεξαρτώμενο Πρόβλημα

$$|DNA(t)\rangle = \sum_{\mu=1}^N A_{\mu}(t) |\mu\rangle$$

$$i\hbar \frac{dA_{\mu}}{dt} = E_{H/L}^{bp\mu} A_{\mu} + t_{H/L}^{bp\mu, \mu-1} A_{\mu-1} + t_{H/L}^{bp\mu, \mu+1} A_{\mu+1}$$

Μελετώμενα πολυμερή

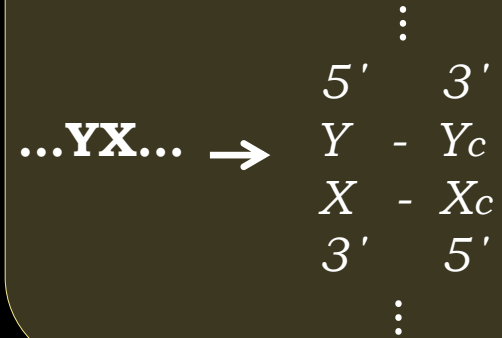
Ο συμβολισμός αναφέρεται μόνο στον ένα κλώνο (5' - 3') αλλά εννοείται και ο συμπληρωματικός.



Μελετώμενα πολυμερή

- Ακολουθία **Fibonacci** : **F G(C)**
 $G \rightarrow C, C \rightarrow CG$
 $F_0 = G, F_1 = G, F_2 = C, F_3 = CG, F_4 = CGC, \dots$
- Ακολουθία **Thue – Morse** : **TM G(C)**
 $G \rightarrow GC, C \rightarrow CG$
 $F_0 = G, F_1 = GC, F_2 = GCCG, F_3 = GCCGCGGC, \dots$
- Ακολουθία **Double-Period** : **DP T(A)**
 $T \rightarrow TA, A \rightarrow TT$
 $F_0 = T, F_1 = TA, F_2 = TATT, F_3 = TATTTATA, \dots$
- Ακολουθία **Rudin – Shapiro** : **RS A(T)**
 $AA \rightarrow AAAT, AT \rightarrow AATA, TA \rightarrow TTAT, TT \rightarrow TTTA$
 $F_0 = A, F_1 = AA, F_2 = AAAT, F_3 = AAATAATA, \dots$

Ο συμβολισμός αναφέρεται μόνο στον ένα κλώνο (5' - 3') αλλά εννοείται και ο συμπληρωματικός.



Μελετώμενα πολυμερή

- Ακολουθία **Fibonacci** : **F G(C)**
 $G \rightarrow C, C \rightarrow CG$
 $F_0 = G, F_1 = G, F_2 = C, F_3 = CG, F_4 = CGC, \dots$
- Ακολουθία **Thue – Morse** : **TM G(C)**
 $G \rightarrow GC, C \rightarrow CG$
 $F_0 = G, F_1 = GC, F_2 = GCCG, F_3 = GCCGCGGC, \dots$
- Ακολουθία **Double-Period** : **DP T(A)**
 $T \rightarrow TA, A \rightarrow TT$
 $F_0 = T, F_1 = TA, F_2 = TATT, F_3 = TATTTATA, \dots$
- Ακολουθία **Rudin – Shapiro** : **RS A(T)**
 $AA \rightarrow AAAT, AT \rightarrow AATA, TA \rightarrow TTAT, TT \rightarrow TTTA$
 $F_0 = A, F_1 = AA, F_2 = AAAT, F_3 = AAATAATA, \dots$
- Ακολουθία **Cantor Set** : **CS T(A)**
 $T \rightarrow TAT, A \rightarrow AAA$
 $F_0 = T, F_1 = TAT, F_2 = TATAAATAT, \dots$
- Ακολουθία **Asymmetric Cantor Set** : **ACS C(G)**
 $C \rightarrow CGCC, G \rightarrow GGGG$
 $F_0 = C, F_1 = CGCC, F_2 = CGCCGGGGCGCCCGCC, \dots$

Ο συμβολισμός αναφέρεται μόνο στον ένα κλώνο (5' - 3') αλλά εννοείται και ο συμπληρωματικός.

⋮

5' 3'

...YX... → Y - Y_c

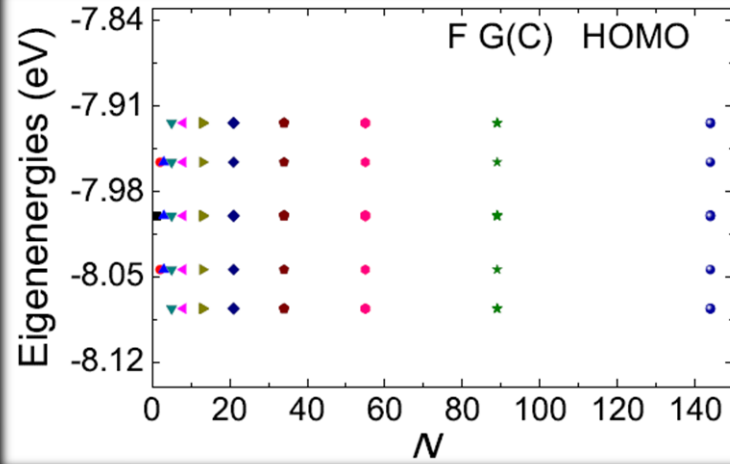
X - X_c

3' 5'

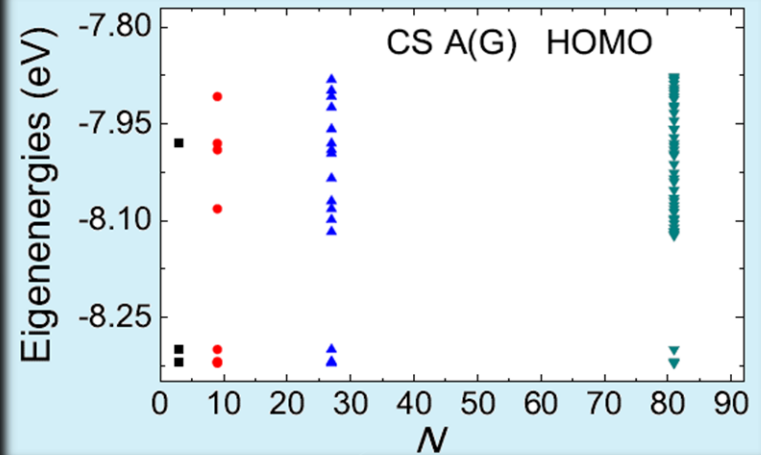
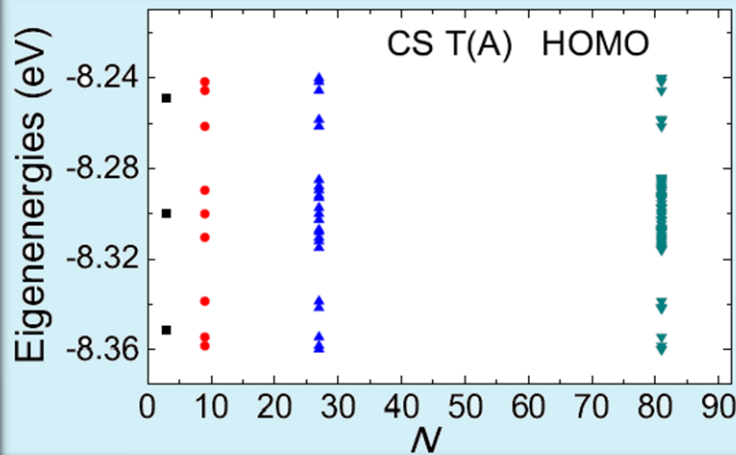
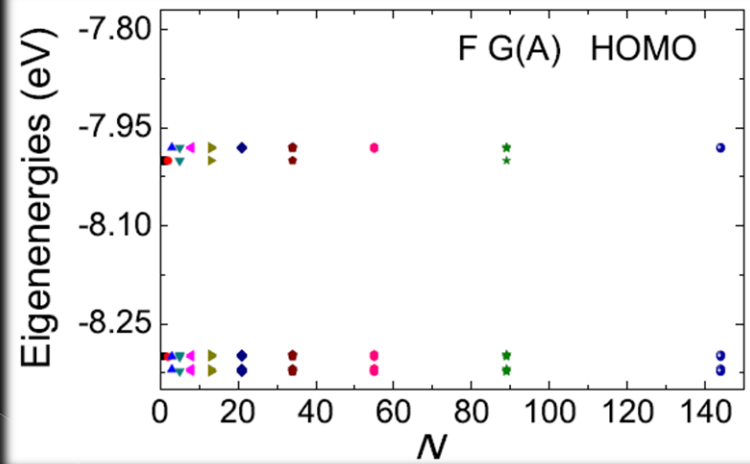
⋮

Ιδιοφάσματα

I πολυμερή

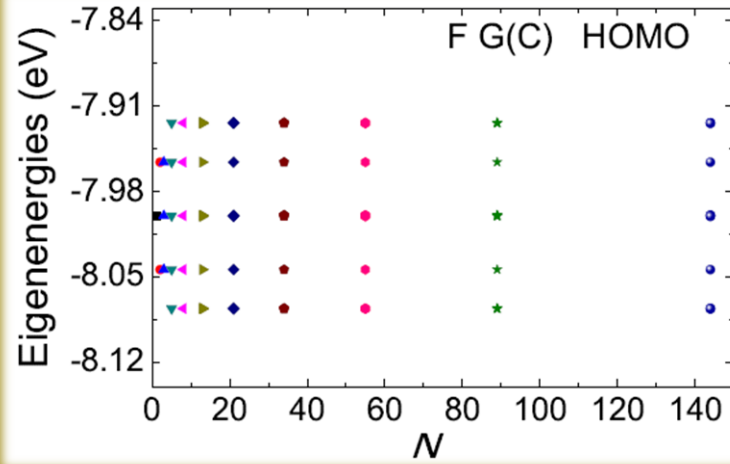


D πολυμερή

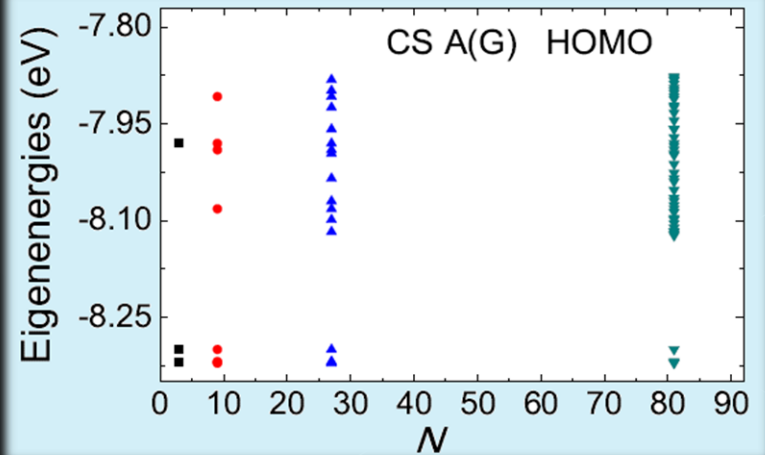
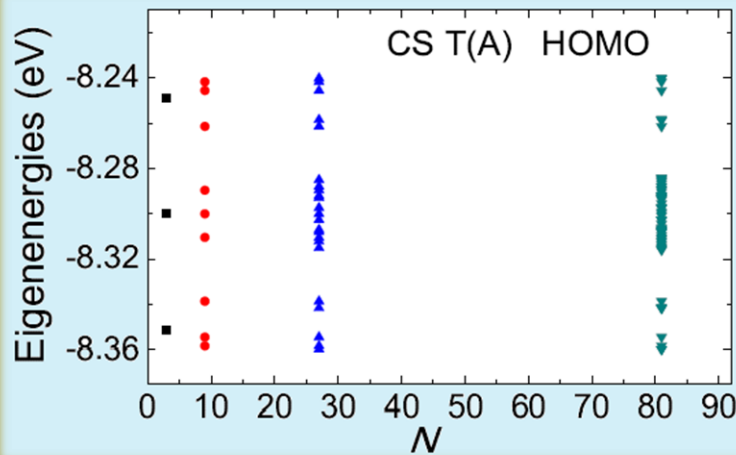
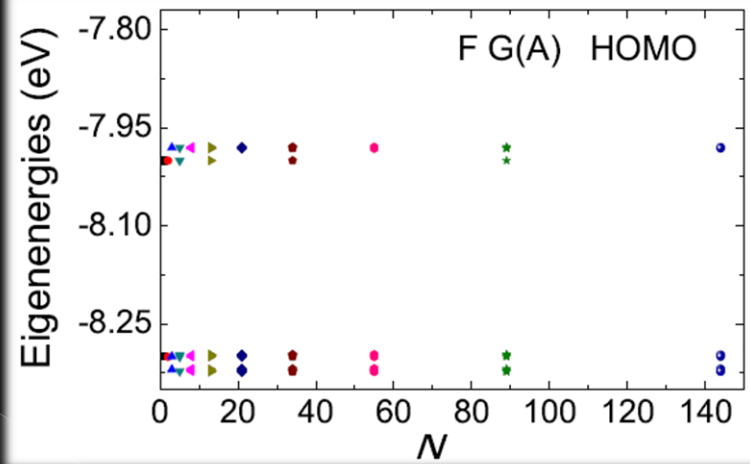


Ιδιοφάσματα

I πολυμερή

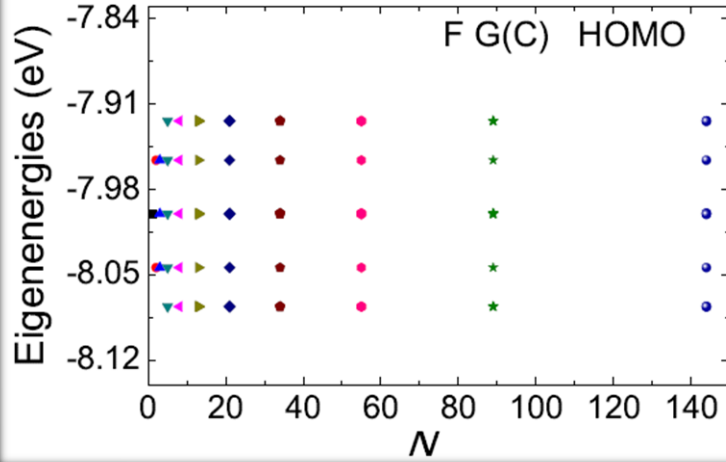


D πολυμερή

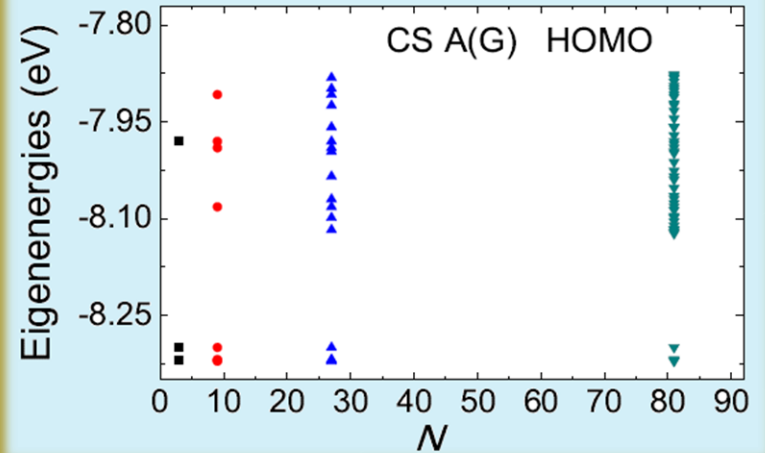
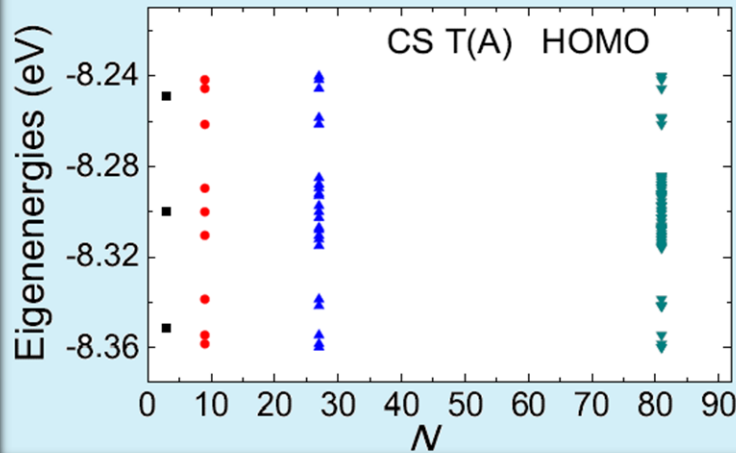
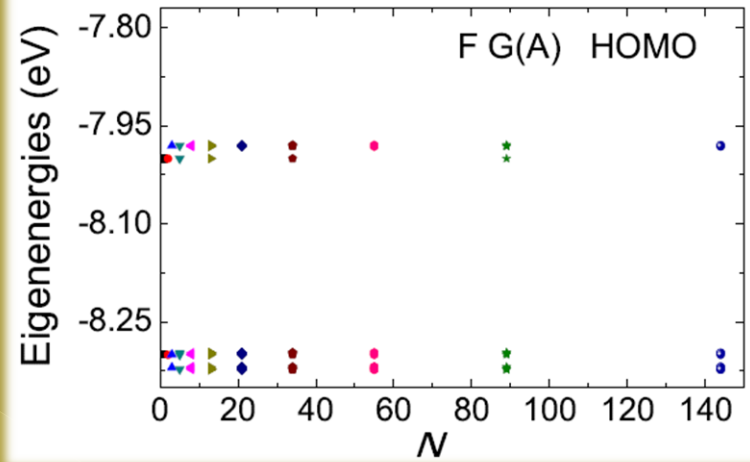


Ιδιοφάσματα

I πολυμερή

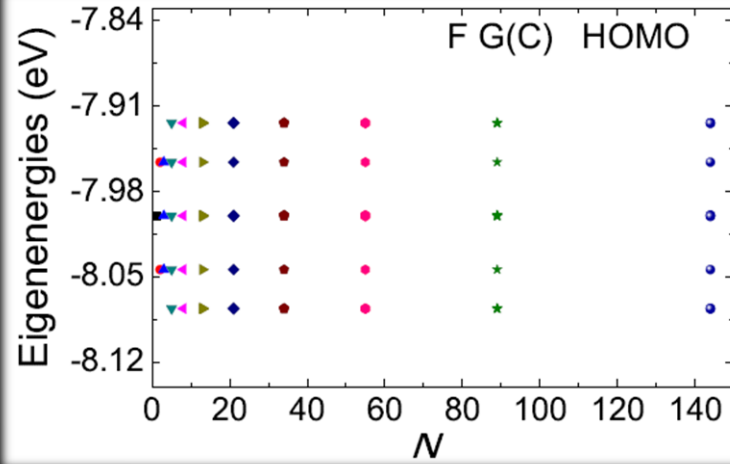


D πολυμερή

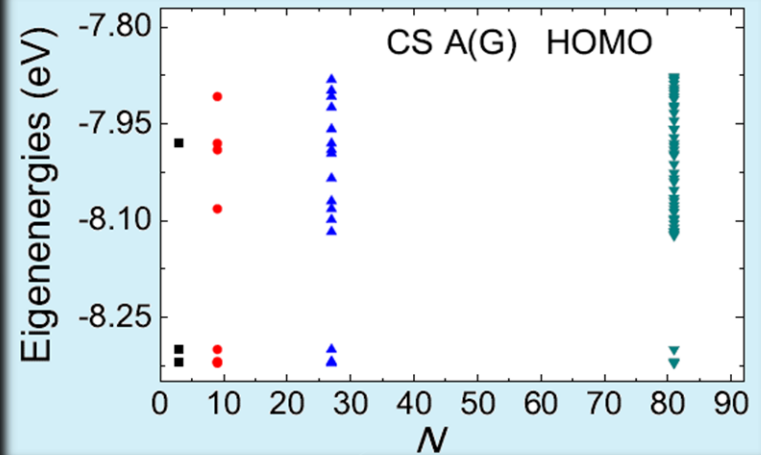
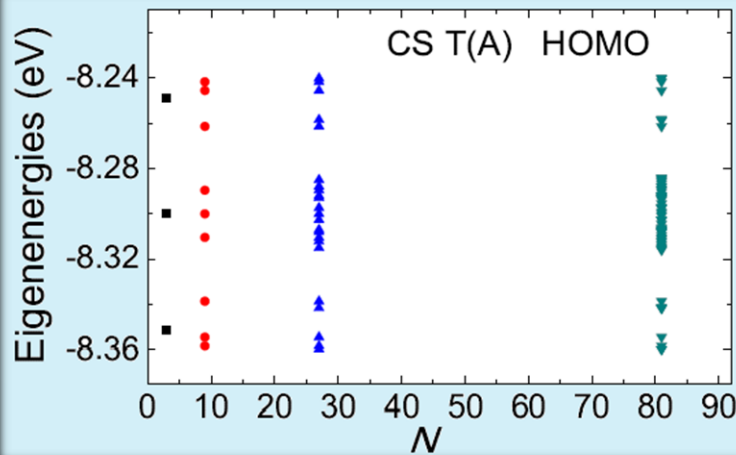
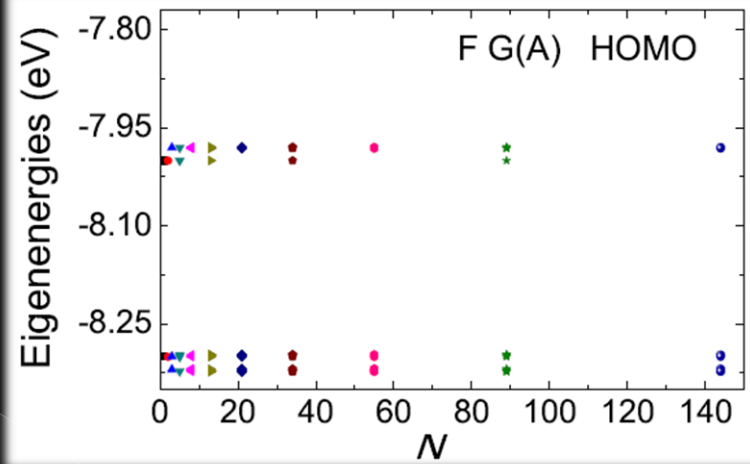


Ιδιοφάσματα

I πολυμερή

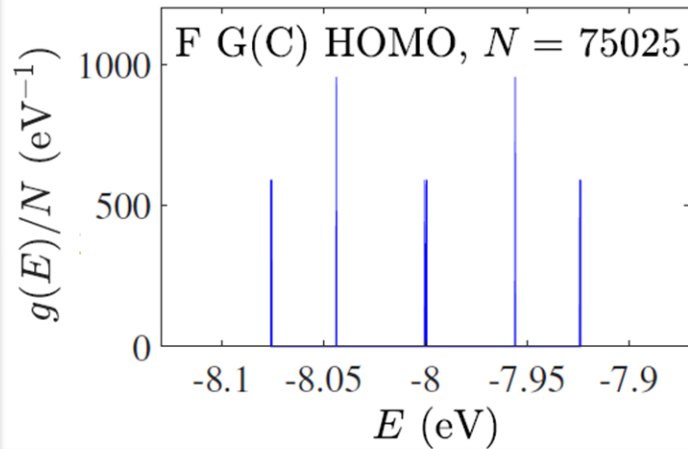


D πολυμερή

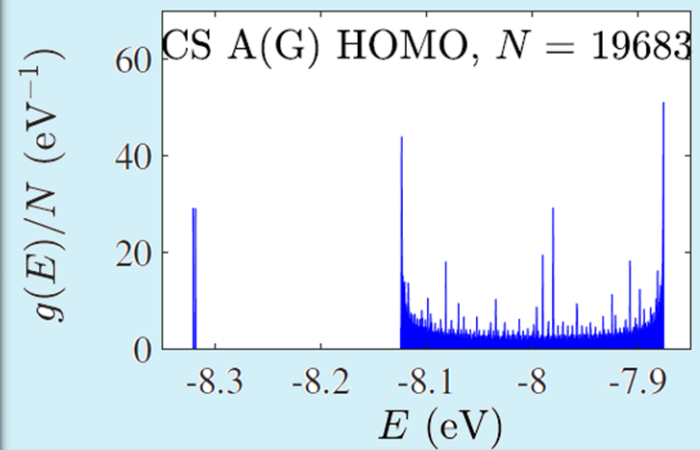
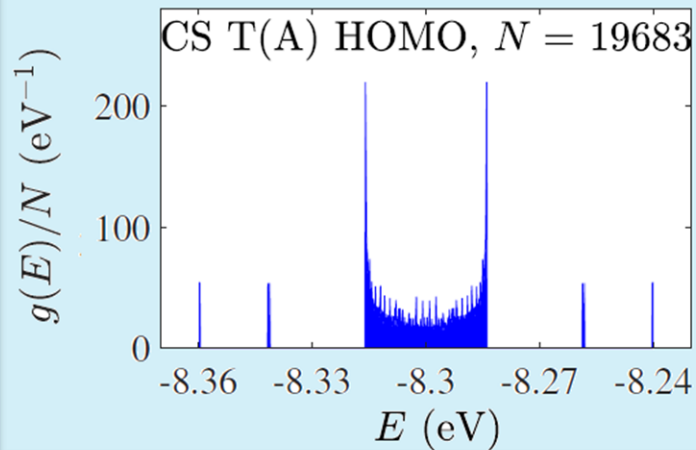
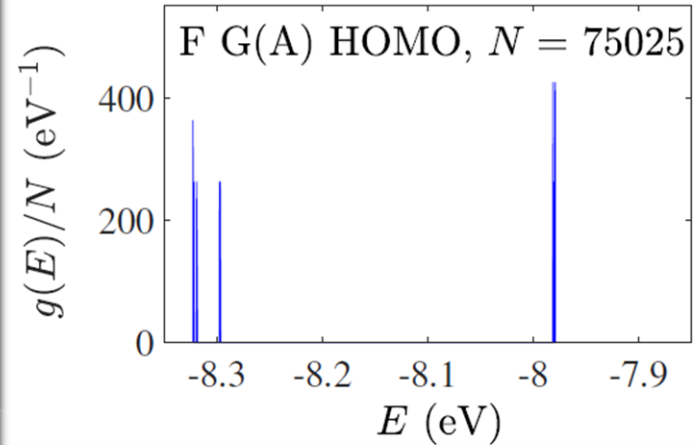


DOS

I πολυμερή



D πολυμερή

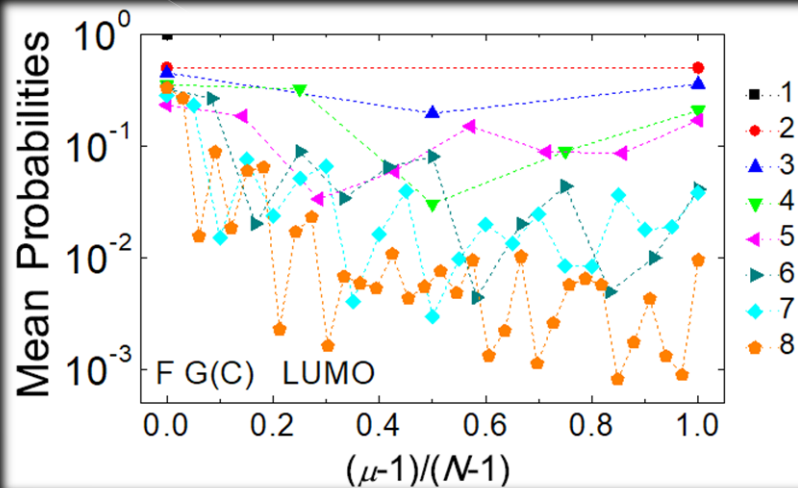


Μέσες (χρονικά) πιθανότητες

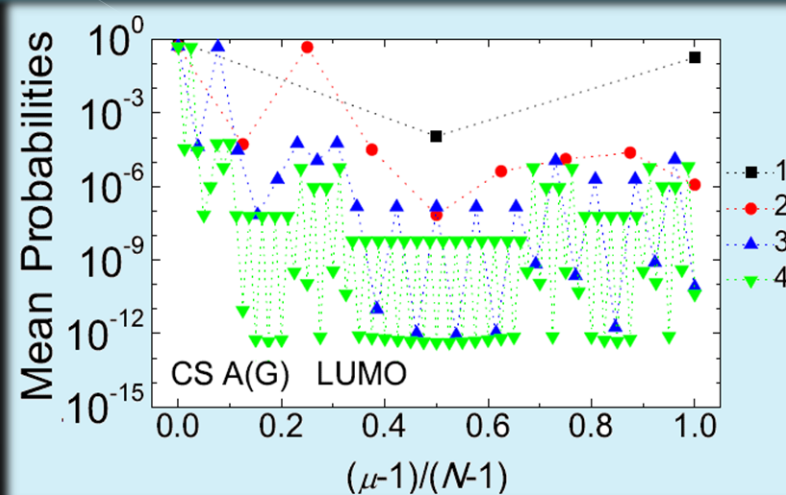
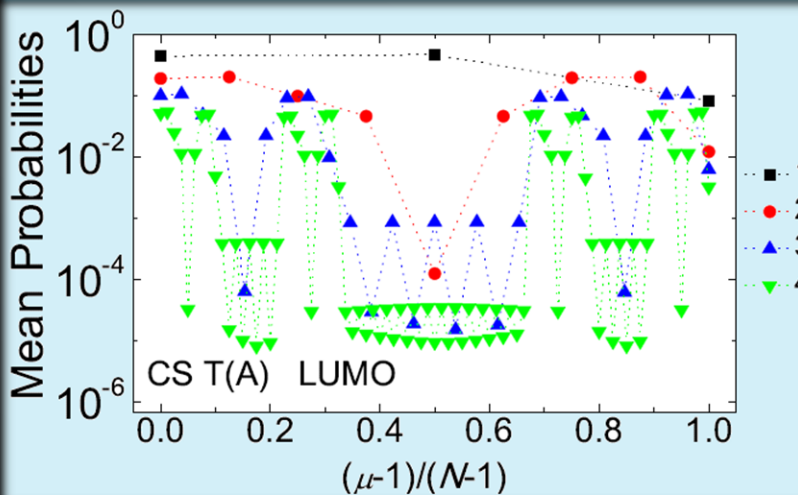
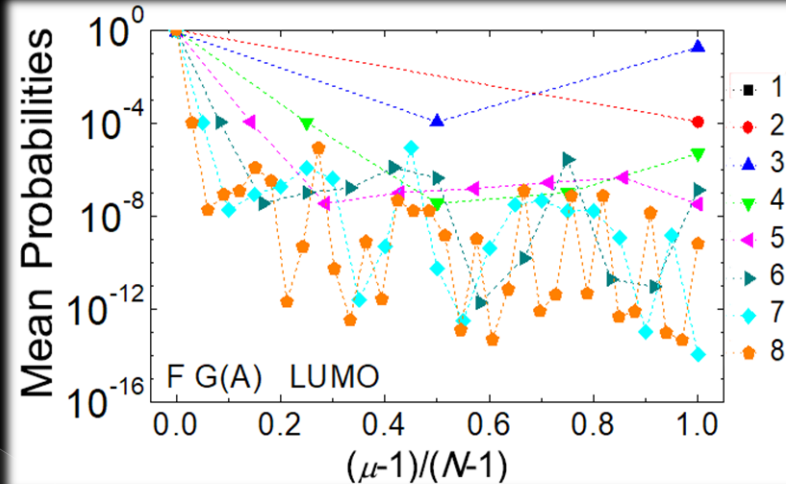
$$\langle |C_{\mu}(t)|^2 \rangle = \sum_{k=1}^N c_k^2 v_{\mu k}^2$$

Μέσες (χρονικά) πιθανότητες

I πολυμερή

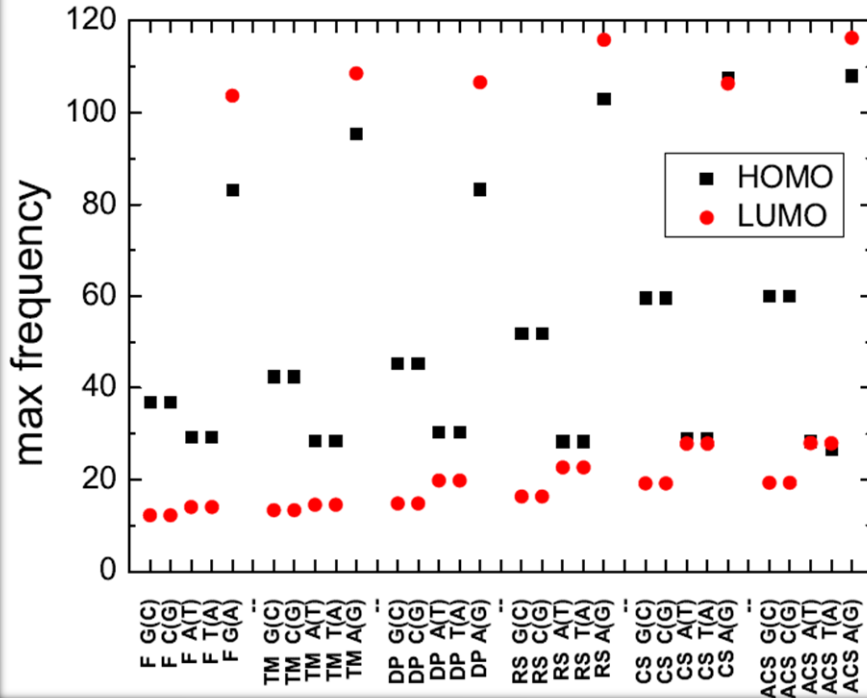


D πολυμερή



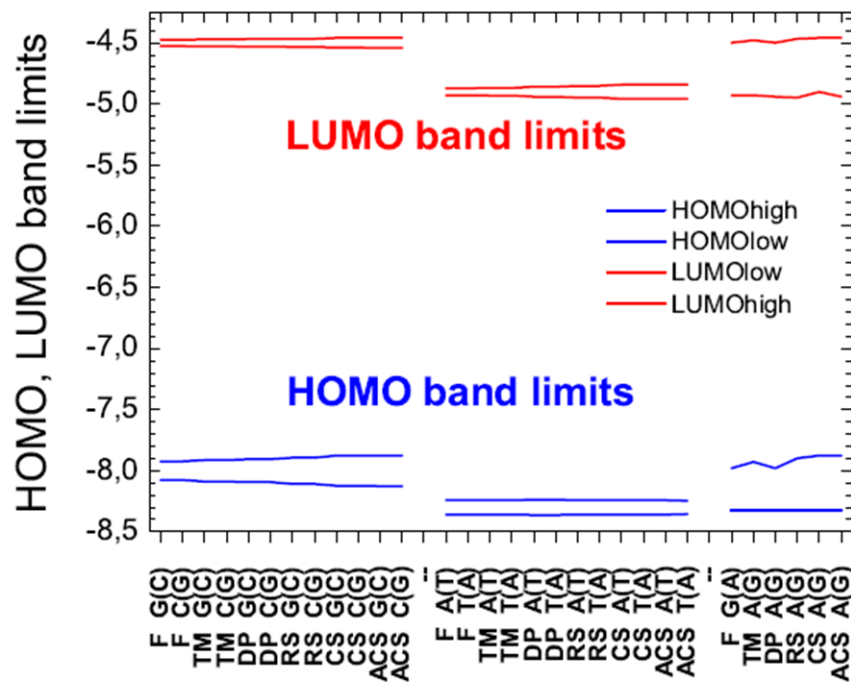
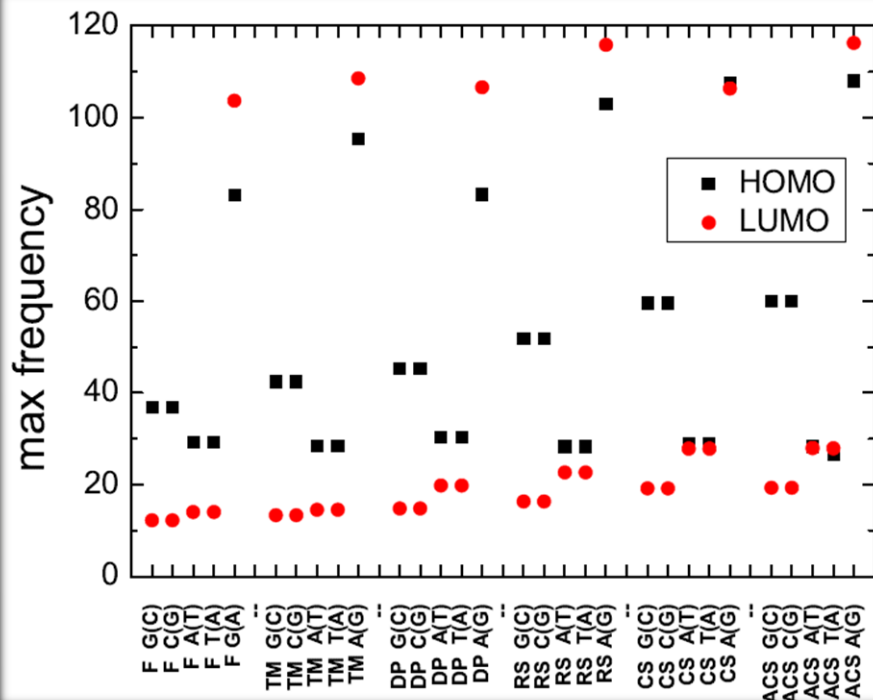
Συχνοτικό περιεχόμενο - TWMF

$$f_{kk'} = \frac{1}{T_{kk'}} = \frac{E_k - E_{k'}}{h}, \quad \forall k > k'$$



Συχνοτικό περιεχόμενο - TWMF

$$f_{kk'} = \frac{1}{T_{kk'}} = \frac{E_k - E_{k'}}{h}, \quad \forall k > k'$$



Συχνοτικό περιεχόμενο - TWMF

- ❖ Οι συντελεστές Fourier που καθορίζουν το πλάτος κάθε συχνότητας ταλάντωσης του επιπλέον φορέα σε μια θέση μ :

$$|\mathcal{F}_\mu(f)| = \sum_{k=1}^N c_k^2 v_{\mu k}^2 \delta(f) + 2 \sum_{k=1}^N \sum_{\substack{k'=1 \\ k' < k}}^N |c_k c_{k'} v_{\mu k} v_{\mu k'}| \delta(f - f_{kk'})$$

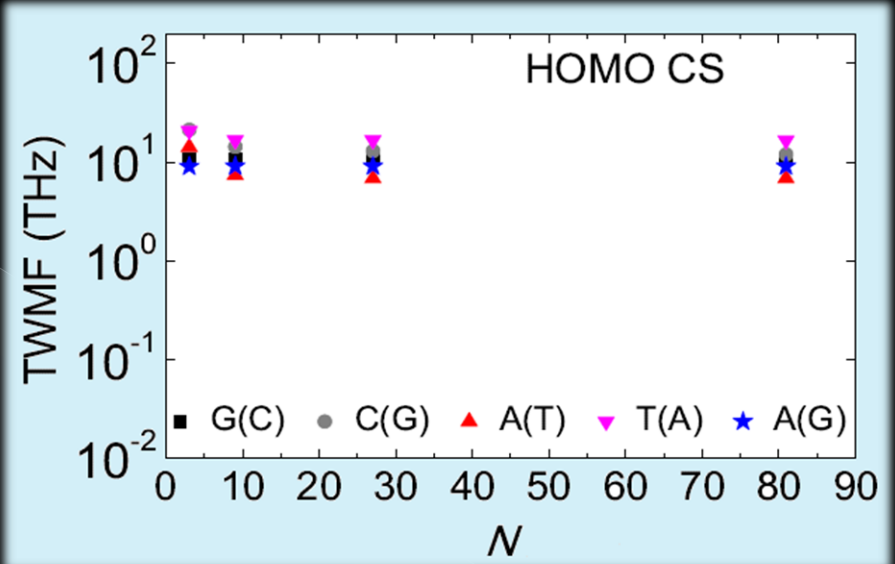
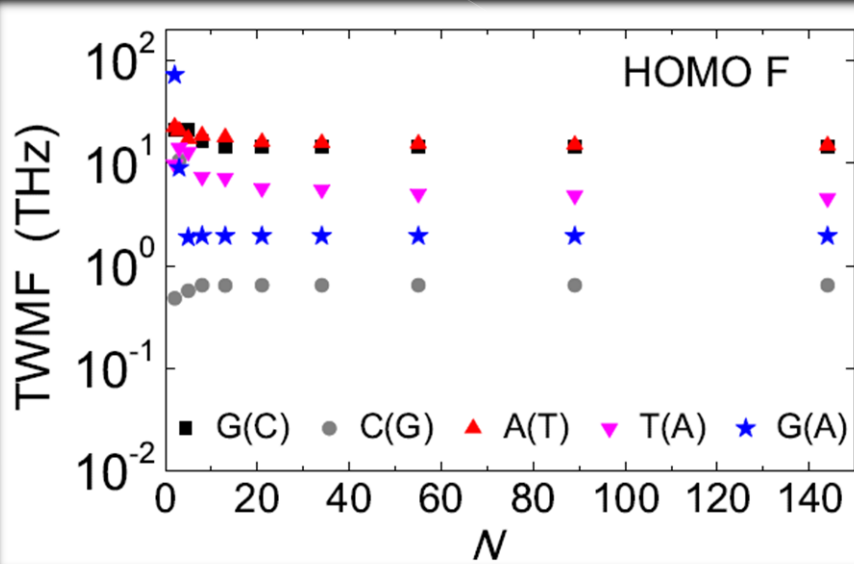
- ❖ Ο σταθμισμένος μέσος των συχνοτήτων ταλάντωσης (Weighted Mean Frequency, WMF):

$$(\text{WMF})_\mu = \frac{\sum_{k=1}^N \sum_{\substack{k'=1 \\ k' < k}}^N |c_k v_{\mu k} c_{k'} v_{\mu k'}| f_{kk'}}{\sum_{k=1}^N \sum_{\substack{k'=1 \\ k' < k}}^N |c_k v_{\mu k} c_{k'} v_{\mu k'}|}$$

- ❖ Ο ολικός σταθμισμένος μέσος των συχνοτήτων ταλάντωσης (Total Weighted Mean Frequency, TWMF) :

$$(\text{TWMF})_\mu = \sum_{\mu=1}^N f_{WM}^\mu \langle |C_\mu(t)|^2 \rangle$$

Συχνοτικό περιεχόμενο - TWMF

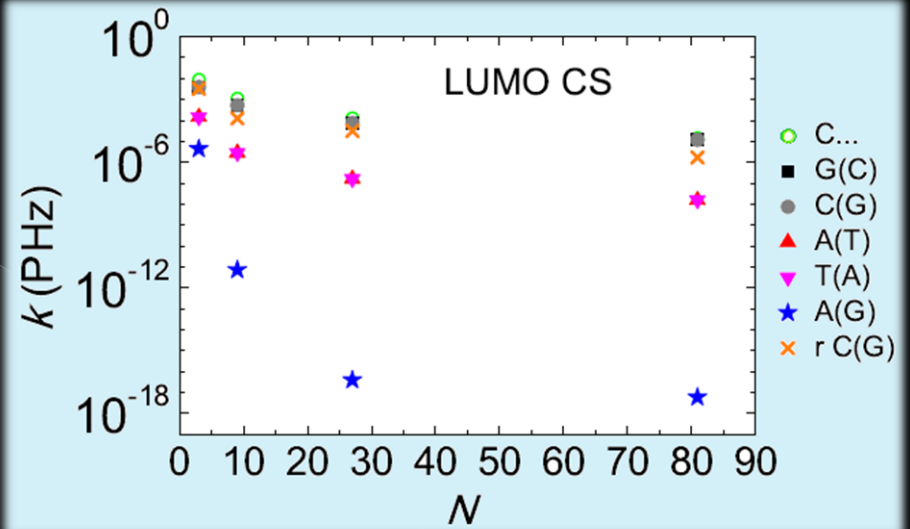
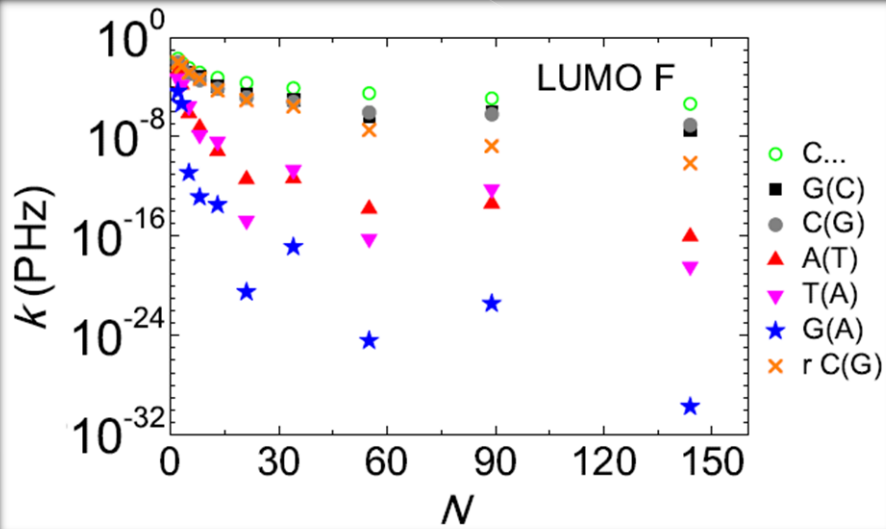


Καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταβίβασης

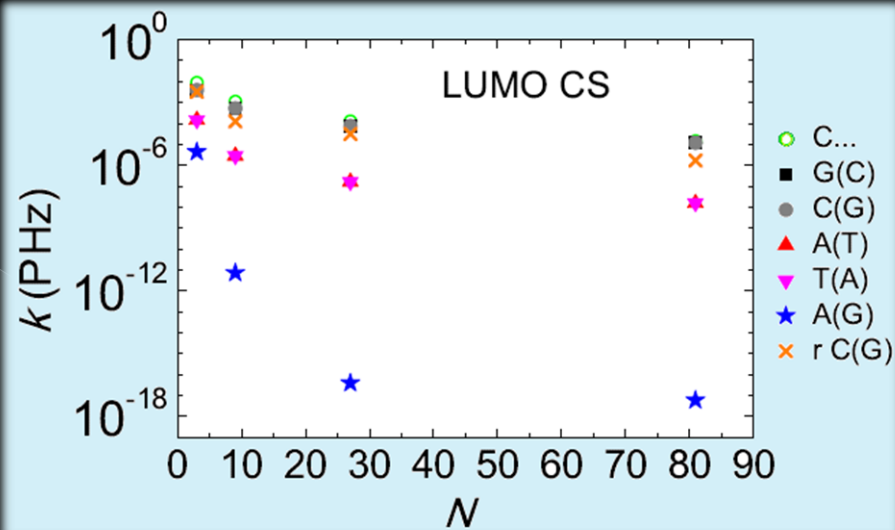
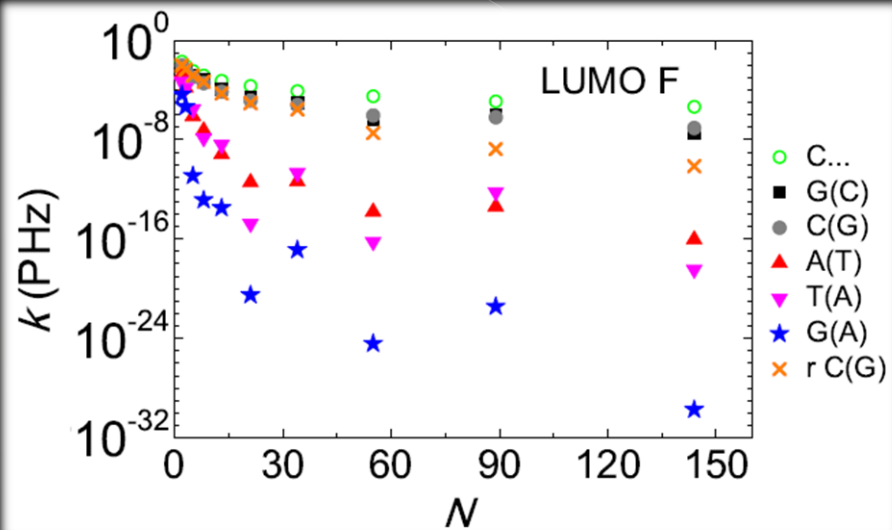
Πιθανότητα εύρεσης του επιπλέον φορέα στο μονομερές μ
Χρόνος που απαιτείται για να γίνει ίση με τη μέση της τιμή για πρώτη φορά, έχοντας τοποθετήσει αρχικά το φορέα στο μονομερές λ :

$$k_{\lambda\mu} = \frac{\langle |C_{\mu}(t)|^2 \rangle}{t_{\lambda\mu}}$$

Καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταβίβασης



Καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταβίβασης



Ομοπολυμερή > I > τυχαία αναδιάταξη I > D

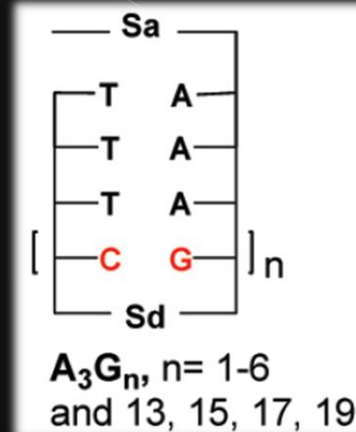
Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα

- Μέχρι πρόσφατα: συστήματα δότη – αποδέκτη, μέτρηση συγκεντρώσεων προϊόντων με gel electrophoresis ή κατεργασία με πιπεριδίνη. Καμία απόδειξη ότι αυτές οι συγκεντρώσεις είναι ανάλογες του ρυθμού μεταβίβασης. Πιο άμεση προσέγγιση: η **χρονικά αναλυμένη φασματοσκοπία**.

Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα

- Μέχρι πρόσφατα: συστήματα δότη – αποδέκτη, μέτρηση συγκεντρώσεων προϊόντων με gel electrophoresis ή κατεργασία με πιπεριδίνη. Καμία απόδειξη ότι αυτές οι συγκεντρώσεις είναι ανάλογες του ρυθμού μεταβίβασης. Πιο άμεση προσέγγιση: η **χρονικά αναλυμένη φασματοσκοπία**.
- S. M. Mickley Conron, A. K. Thazhathveetil, M. R. Wasielewski, A. L. Burin, and F. D. Lewis, “*Direct Measurement of the Dynamics of Hole Hopping in Extended DNA G-Tracts. An Unbiased Random Walk*”, J. Am. Chem. Soc. **132**, 14388-14390 (2010).

○ Hairpins :



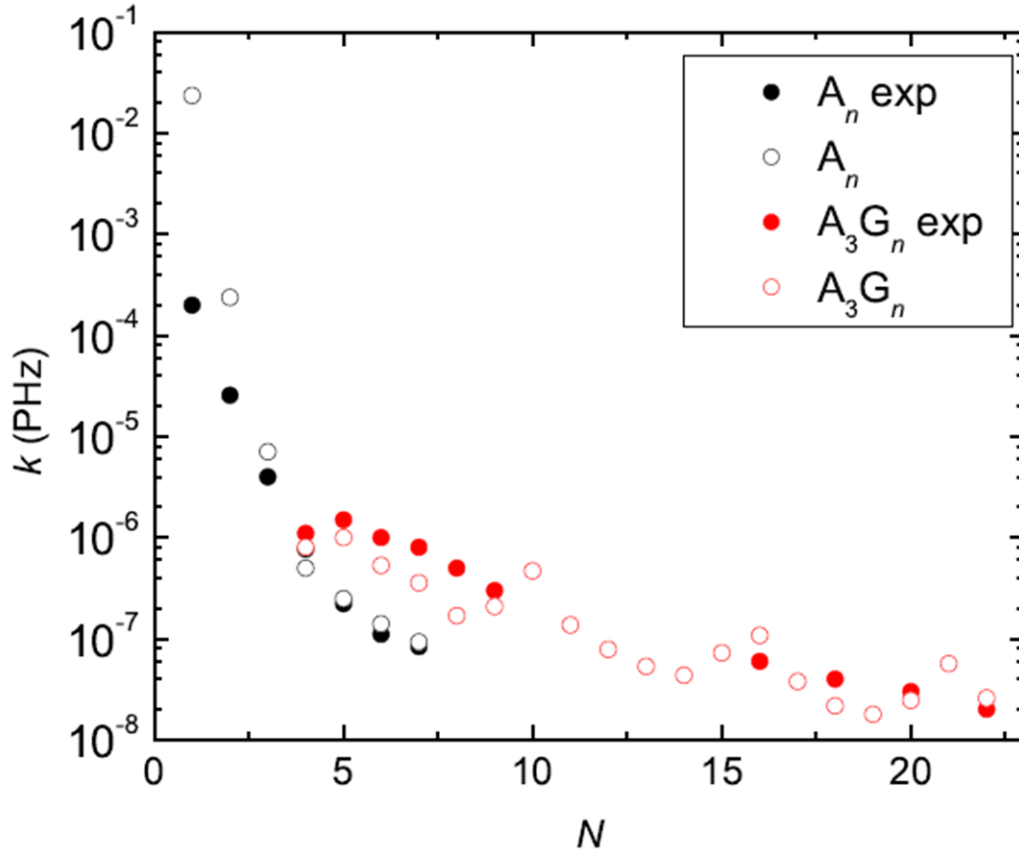
Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα

- Παραμετροποίηση:
 $t_{AA} \rightarrow 1.6t_{AA}$, $t_{AG} \rightarrow 2.1t_{AG}$,
 $t_{GG} \rightarrow 2.25t_{AG}$

Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα

- Παραμετροποίηση:
 $t_{AA} \rightarrow 1.6t_{AA}$, $t_{AG} \rightarrow 2.1t_{AG}$,
 $t_{GG} \rightarrow 2.25t_{AG}$
- $E_{don} = E_{A-T} - 0.1 \text{ eV}$,
 $E_{ac} = E_{G-C} + 0.1 \text{ eV}$

Ρυθμοί μεταβίβασης σε πειράματα



- Παραμετροποίηση:
 $t_{AA} \rightarrow 1.6t_{AA}$, $t_{AG} \rightarrow 2.1t_{AG}$,
 $t_{GG} \rightarrow 2.25t_{AG}$
- $E_{don} = E_{A-T} - 0.1$ eV,
 $E_{ac} = E_{G-C} + 0.1$ eV

Συμπεράσματα

- ✓ **Ιδιοφάσματα και DOS:** για τα **I** πολυμερή συμμετρικά γύρω από την E_{bp} ενώ για τα **D** πολυμερή συμμετρικά γύρω από τις δύο E_{bp} . Οιονεί περιοδικά: οξύτερες υποζώνες.
- ✓ **Μέσες πιθανότητες:** για τα **I** πολυμερή συγκεντρώνονται κοντά στο μονομερές στο οποίο τοποθετήθηκε αρχικά ο φορέας, ενώ για τα **D** πολυμερή είναι γενικά αμελητέες μακρύτερα από το αρχικό μονομερές.
- ✓ **Συχνοτικό περιεχόμενο:** 0.01-100 THz (FIR, MIR). Ο **TWMP** σταθεροποιείται μετά από μικρό αριθμό γενεών.
- ✓ **Καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταβίβασης:** ο φορέας μεταβιβάζεται πιο αργά στα μεγαλύτερα πολυμερή. Ομοπολυμερή $> I >$ τυχαία αναδιάταξη $I > D$
- ✓ Τα ομοπολυμερή ως δομικά απλούστερες περιπτώσεις κρίνονται καταλληλότερα για μεταβίβαση φορτίου.
- ✓ Με κατάλληλη παραμετροποίηση η Προσέγγιση Ισχυρής Δέσμευσης δίνει συγκρίσιμα αποτελέσματα με τα πειραματικά από χρονικά αναλυμένη φασματοσκοπία.

Συμπεράσματα

- ✓ **Ιδιοφάσματα και DOS:** για τα **I** πολυμερή συμμετρικά γύρω από την E_{bp} ενώ για τα **D** πολυμερή συμμετρικά γύρω από τις δύο E_{bp} . Οιονεί περιοδικά: οξύτερες υποζώνες.
- ✓ **Μέσες πιθανότητες:** για τα **I** πολυμερή συγκεντρώνονται κοντά στο μονομερές στο οποίο τοποθετήθηκε αρχικά ο φορέας, ενώ για τα **D** πολυμερή είναι γενικά αμελητέες μακρύτερα από το αρχικό μονομερές.
- ✓ **Συχνοτικό περιεχόμενο:** 0.01-100 THz (FIR, MIR). Ο **TWMP** σταθεροποιείται μετά από μικρό αριθμό γενεών.
- ✓ **Καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταβίβασης:** ο φορέας μεταβιβάζεται πιο αργά στα μεγαλύτερα πολυμερή. Ομοπολυμερή $> I >$ τυχαία αναδιάταξη $I > D$
- ✓ Τα ομοπολυμερή ως δομικά απλούστερες περιπτώσεις κρίνονται καταλληλότερα για μεταβίβαση φορτίου.
- ✓ Με κατάλληλη παραμετροποίηση η Προσέγγιση Ισχυρής Δέσμευσης δίνει συγκρίσιμα αποτελέσματα με τα πειραματικά από χρονικά αναλυμένη φασματοσκοπία.

Συμπεράσματα

- ✓ **Ιδιοφάσματα και DOS:** για τα **I** πολυμερή συμμετρικά γύρω από την E_{bp} ενώ για τα **D** πολυμερή συμμετρικά γύρω από τις δύο E_{bp} . Οιονεί περιοδικά: οξύτερες υποζώνες.
- ✓ **Μέσες πιθανότητες:** για τα **I** πολυμερή συγκεντρώνονται κοντά στο μονομερές στο οποίο τοποθετήθηκε αρχικά ο φορέας, ενώ για τα **D** πολυμερή είναι γενικά αμελητέες μακρύτερα από το αρχικό μονομερές.
- ✓ **Συχνοτικό περιεχόμενο:** 0.01-100 THz (FIR, MIR). Ο **TWMP** σταθεροποιείται μετά από μικρό αριθμό γενεών.
- ✓ **Καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταβίβασης:** ο φορέας μεταβιβάζεται πιο αργά στα μεγαλύτερα πολυμερή. Ομοπολυμερή $> I >$ τυχαία αναδιάταξη $I > D$
- ✓ Τα ομοπολυμερή ως δομικά απλούστερες περιπτώσεις κρίνονται καταλληλότερα για μεταβίβαση φορτίου.
- ✓ Με κατάλληλη παραμετροποίηση η Προσέγγιση Ισχυρής Δέσμευσης δίνει συγκρίσιμα αποτελέσματα με τα πειραματικά από χρονικά αναλυμένη φασματοσκοπία.

Συμπεράσματα

- ✓ **Ιδιοφάσματα και DOS:** για τα **I** πολυμερή συμμετρικά γύρω από την E_{bp} ενώ για τα **D** πολυμερή συμμετρικά γύρω από τις δύο E_{bp} . Οιονεί περιοδικά: οξύτερες υποζώνες.
- ✓ **Μέσες πιθανότητες:** για τα **I** πολυμερή συγκεντρώνονται κοντά στο μονομερές στο οποίο τοποθετήθηκε αρχικά ο φορέας, ενώ για τα **D** πολυμερή είναι γενικά αμελητέες μακρύτερα από το αρχικό μονομερές.
- ✓ **Συχνοτικό περιεχόμενο:** 0.01-100 THz (FIR, MIR). Ο **TWMP** σταθεροποιείται μετά από μικρό αριθμό γενεών.
- ✓ **Καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταβίβασης:** ο φορέας μεταβιβάζεται πιο αργά στα μεγαλύτερα πολυμερή. Ομοπολυμερή $> I >$ τυχαία αναδιάταξη $I > D$
- ✓ Τα ομοπολυμερή ως δομικά απλούστερες περιπτώσεις κρίνονται καταλληλότερα για μεταβίβαση φορτίου.
- ✓ Με κατάλληλη παραμετροποίηση η Προσέγγιση Ισχυρής Δέσμευσης δίνει συγκρίσιμα αποτελέσματα με τα πειραματικά από χρονικά αναλυμένη φασματοσκοπία.

Συμπεράσματα

- ✓ **Ιδιοφάσματα** και **DOS**: για τα **I** πολυμερή συμμετρικά γύρω από την E_{bp} ενώ για τα **D** πολυμερή συμμετρικά γύρω από τις δύο E_{bp} . Οιονεί περιοδικά: οξύτερες υποζώνες.
- ✓ **Μέσες πιθανότητες**: για τα **I** πολυμερή συγκεντρώνονται κοντά στο μονομερές στο οποίο τοποθετήθηκε αρχικά ο φορέας, ενώ για τα **D** πολυμερή είναι γενικά αμελητέες μακρύτερα από το αρχικό μονομερές.
- ✓ **Συχνοτικό περιεχόμενο**: 0.01-100 THz (FIR, MIR). Ο **TWMP** σταθεροποιείται μετά από μικρό αριθμό γενεών.
- ✓ **Καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταβίβασης**: ο φορέας μεταβιβάζεται πιο αργά στα μεγαλύτερα πολυμερή. Ομοπολυμερή $> I >$ τυχαία αναδιάταξη $I > D$
- ✓ Τα ομοπολυμερή ως δομικά απλούστερες περιπτώσεις κρίνονται καταλληλότερα για μεταβίβαση φορτίου.
- ✓ Με κατάλληλη παραμετροποίηση η Προσέγγιση Ισχυρής Δέσμευσης δίνει συγκρίσιμα αποτελέσματα με τα πειραματικά από χρονικά αναλυμένη φασματοσκοπία.

Συμπεράσματα

- ✓ **Ιδιοφάσματα και DOS:** για τα **I** πολυμερή συμμετρικά γύρω από την E_{bp} ενώ για τα **D** πολυμερή συμμετρικά γύρω από τις δύο E_{bp} . Οιονεί περιοδικά: οξύτερες υποζώνες.
- ✓ **Μέσες πιθανότητες:** για τα **I** πολυμερή συγκεντρώνονται κοντά στο μονομερές στο οποίο τοποθετήθηκε αρχικά ο φορέας, ενώ για τα **D** πολυμερή είναι γενικά αμελητέες μακρύτερα από το αρχικό μονομερές.
- ✓ **Συχνοτικό περιεχόμενο:** 0.01-100 THz (FIR, MIR). Ο **TWMP** σταθεροποιείται μετά από μικρό αριθμό γενεών.
- ✓ **Καθαροί μέσοι ρυθμοί μεταβίβασης:** ο φορέας μεταβιβάζεται πιο αργά στα μεγαλύτερα πολυμερή. Ομοπολυμερή $> I >$ τυχαία αναδιάταξη $I > D$
- ✓ Τα ομοπολυμερή ως δομικά απλούστερες περιπτώσεις κρίνονται καταλληλότερα για μεταβίβαση φορτίου.
- ✓ Με κατάλληλη παραμετροποίηση η Προσέγγιση Ισχυρής Δέσμευσης δίνει συγκρίσιμα αποτελέσματα με τα πειραματικά από χρονικά αναλυμένη φασματοσκοπία.

Ευχαριστίες

Τριμελής Συμβουλευτική Επιτροπή

- Κωνσταντίνος Σιμσερίδης, Επικ. Καθηγητής (επιβλέπων)
- Σπυρίδων Γαρδέλης, Αναπλ. Καθηγητής
- Ιωάννης Λελίδης, Επικ. Καθηγητής

Συνεργάτες

- Κωνσταντίνος Λαμπρόπουλος, Υποψ. Διδάκτορας
- Ανδρέας Μόρφης, Υποψ. Διδάκτορας

«Το έργο συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Ενίσχυση του ανθρώπινου ερευνητικού δυναμικού μέσω της υλοποίησης διδακτορικής έρευνας» (MIS-5000432), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ)»



Επιχειρησιακό Πρόγραμμα
Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού,
Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Ευχαριστώ πολύ για την προσοχή σας!

Σχετικές εργασίες/δημοσιεύσεις:

- M. Mantela, K. Lambropoulos, M. C. Simserides, Quasi-periodic and fractal polymers: Energy structure and carrier transfer, <https://arxiv.org/abs/1901.06273> (*submitted*)
- K. Lambropoulos, C. Vantaraki, P. Bilia, M. Mantela, C. Simserides, Periodic polymers with increasing repetition unit: Energy structure and carrier transfer, *Phys. Rev. E* **98**, 032412 (2018).
- Μαριλένα Μαντέλα, «Μεταβίβαση φορτίου σε απεριοδικά τμήματα Β-DNA: Περιγραφή Ισχυρής Δέσμησης σε επίπεδο ζευγών βάσεων», Μεταπτυχιακή διπλωματική εργασία, *Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών*, 2017.
- C. Simserides, A systematic study of electron or hole transfer along DNA dimers, trimers and polymers, *Chemical Physics* **440**, 31 (2014).