



Τεχνολογικό
Πανεπιστήμιο
Κύπρου

Σχολή Γεωτεχνικών
Επιστημών και
Διαχείρισης
Περιβάλλοντος

Πτυχιακή εργασία

**ΕΠΙΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΙΚΗΣ
ΧΗΜΕΙΑΣ ΜΕ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ**

Παναγιώτα Κατσώνη

Λεμεσός, Μάιος 2017

ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΓΕΩΤΕΧΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ
ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

Πτυχιακή εργασία

ΕΠΙΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΙΚΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ
ΜΕ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ

της

Παναγιώτας Κατσώνης

Επιβλέπων Καθηγητής
Δρ. Ευάγγελος Δασκαλάκη

Λεμεσός, Μάιος 2017

Πνευματικά δικαιώματα

Copyright © Παναγιώτα Κατσώνη, 2017

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Η έγκριση της πτυχιακής εργασίας από το Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας του Περιβάλλοντος του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου δεν υποδηλώνει απαραίτητως και αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα εκ μέρους του Τμήματος.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερα τον επιβλέποντα καθηγητή μου Δρ. Ευάγγελο Δασκαλάκη ο οποίος μου εμπιστεύθηκε αυτό το θέμα για την πτυχιακή μου. Τον ευχαριστώ θερμά για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε και για την καθοδήγηση που μου παρέδωσε στη διάρκεια της πτυχιακής μου. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τη διδακτορική φοιτήτρια Αναστασία Σαλάμεχ για τη βοήθεια που μου παρείχε και για τις συμβουλές της καθ' όλη τη διάρκεια της πτυχιακής μου. Ακόμη θα ήθελα να πω ένα μεγάλο ευχαριστώ στους φίλους μου που πάντα ήταν δίπλα μου στις δύσκολες στιγμές που υπήρξαν κατά τη διάρκεια των σπουδών μου αλλά και τη συμπαράσταση για τη διεκπεραίωση της πτυχιακής μου. Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για τη συμπαράσταση που έδωσαν καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου και ιδιαίτερα τον τελευταίο χρόνο που ήταν πολύ απαιτητικός. Έδειξαν κατανόηση στις πιεστικές καταστάσεις και πάντα είναι δίπλα μου και με στηρίζουν σε όλα και μου έδειξαν απόλυτη εμπιστοσύνη.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα μελέτη είναι βιβλιογραφική ανασκόπηση της επίλυσης των επιστημονικών κενών που προέκυψαν από την μελέτη της ατμοσφαιρικής χημείας με τη χρήση της Μοριακής Δυναμικής. Τα στοιχεία που λαμβάνονται για την μελέτη πάρθηκαν από την έρευνα που πραγματοποίησε η ομάδα της ατμοσφαιρικής χημείας του National Science Foundation (NSF). Μέσα από αυτή την έρευνα προέκυψαν κάποια επιστημονικά κενά τα οποία θα πρέπει να επιλυθούν για να δούμε τις επιδράσεις κάποιων μορίων στην ατμόσφαιρα και να μπορούν να προχωρήσουν την έρευνα. Η ατμόσφαιρα μεταβάλλεται ανάλογα με τις συνθήκες που επικρατούν από τα μόρια που βρίσκονται στο χώρο. Για τη μελέτη των μορίων που βρίσκονται στην ατμόσφαιρα και για το πώς επιδρούν θα γίνουν προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής. Με τη μοριακή δυναμική μπορούμε να μελετήσουμε συστήματα με συνθήκες της ατμόσφαιρας όπου δεν μπορούμε να τις πραγματοποιήσουμε σε συνθήκες εργαστηρίου. Η μελέτη βασίζεται στη Μοριακή Δυναμική όπου έχει μεγάλο εύρος.

Λέξεις κλειδιά: ατμοσφαιρική χημεία, μοριακή δυναμική, επίλυση ατμοσφαιρικών προβλημάτων

ABSTRACT

The present study is a bibliographic review of the solution of the scientific gaps arising from the study of atmospheric chemistry using Molecular Dynamics. The data obtained for the study were taken from the research conducted by the National Science Foundation's (NSF) atmospheric chemistry team. Through this research some scientific loopholes have emerged which need to be resolved to be able to find the effects of some molecules in the atmosphere and to be able to carry on with the research. The atmosphere varies according to the conditions prevailing in the molecules in the space. For the study of the molecules in the atmosphere and what influence they have, molecular dynamics simulations will take place. With molecular dynamics, systems with atmospheric conditions are studied where we cannot do them in laboratory conditions. The study is based on Molecular Dynamics where it has a wide range.

Key words: atmospheric chemistry, molecular dynamics, solve atmospheric problems