

ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΓΕΩΤΕΧΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ



Πτυχιακή Διατριβή

ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗ ΕΞΑΡΤΗΣΗ ΤΗΣ
ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΠΥΡΗΝΩΝ ΔΙΟΞΕΙΔΙΟΥ ΤΟΥ
ΑΝΘΡΑΚΑ ΣΕ ΥΔΑΤΙΚΑ ΑΕΡΟΛΥΜΑΤΑ

Νεάρχου Ειρήνη

Λεμεσός 2014

« Τα ψυχρά θέρεται, θερμόν ψύχεται, υγρόν αναίνεται, καρφαλέον νοτίζεται. »

Ηράκλειτος, 544-484 π.Χ., Έων φιλόσοφος

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

Πτυχιακή Διατριβή

ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΗ ΕΞΑΡΤΗΣΗ ΤΗΣ
ΔΗΜΙΟΥΡΓΙΑΣ ΠΥΡΗΝΩΝ ΔΙΟΞΕΙΔΙΟΥ ΤΟΥ
ΑΝΘΡΑΚΑ ΣΕ ΥΔΑΤΙΚΑ ΑΕΡΟΛΥΜΑΤΑ

Νεάρχου Ειρήνη
Επιβλέπων καθηγητής
Δρ. Ευάγγελος Δασκαλάκης

Λεμεσός 2014

Πνευματικά δικαιώματα

Copyright © Νεάρχου Ειρήνη, 2014

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

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

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η παρούσα πτυχιακή διατριβή εκπονήθηκε στο εργαστήριο Υπολογιστικών Περιβαλλοντικών Μοντέλων – Υπολογιστικής Φυσικής της Ατμόσφαιρας του τμήματος Επιστήμης και Τεχνολογίας Περιβάλλοντος, στο Τεχνολογικό Πανεπιστήμιο Κύπρου, υπό την συνεχή επίβλεψη του καθηγητή του τμήματος, Δρ. Ευάγγελο Δασκαλάκη στον οποίο εκφράζω τις βαθύτατες ευχαριστίες μου για την επιστημονική καθοδήγηση και ιδιαίτερα για το αμέριστο ενδιαφέρον που έδειξε.

Μου μετάδωσε τις γνώσεις του και με βοήθησε να εναρμονιστώ στο χώρο, στο σύνολο και στη δουλειά του εργαστηρίου με τον καλύτερο τρόπο. Οι σημαντικές υποδείξεις και συμβουλές του μου πρόσφεραν σημαντικά εφόδια για την μετέπειτα ζωή μου.

Τέλος, θέλω να εκφράσω ένα μεγάλο ευχαριστώ στην οικογένεια μου για την αμέριστη ηθική υποστήριξη και την εμπιστοσύνη που μου έδειξε καθ' όλη τη διάρκεια των προπτυχιακών σπουδών μου.

*Πάντα στον νου σου νάχεις την Ιθάκη.
Το φθάσιμον εκεί είν' ο προορισμός σου.*

...

*Η Ιθάκη σ' έδωσε τ' ωραίο ταξείδι.
Χωρίς αυτήν δενθάβγαινεις στον δρόμο.
Αλλα δεν έχει να σε δώσει πια.*

*Κι αν πτωχική την βρεις, η Ιθάκη δεν σε γέλασε.
Έτσι σοφός που έγινες, με τόση πείρα,*

ήδη θα το κατάλαβες η Ιθάκες τι σημαίνουν.

Κ.Π. Καβάφης

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Μελετήθηκαν μοντέλα της δυναμικής συμπεριφοράς του διοξειδίου του άνθρακα (CO_2) κατά τη μετάβασή του από την υδάτινη στην αέρια φάση, για ένα εύρος διαφορετικών θερμοκρασιών με σταθερή πίεση. Η παρούσα διατριβή αφορά τη θεωρητική μελέτη και το σχεδιασμό μοντέλου-δομής υδατικών αερολυμάτων εμπλουτισμένων με CO_2 με τη χρήση γραφικού περιβάλλοντος σε ηλεκτρονικό υπολογιστή. Εξειδικευμένο λογισμικό προσδιορίζει τη δομή χαμηλότερης ενέργειας βάσει της Μοριακής Μηχανικής και τη χρόνο-εξαρτώμενη συμπεριφορά του με βάση τη Μοριακή Δυναμική.

Σκοπός της μελέτης ήταν η εφαρμογή – και αξιολόγηση – της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής στη σωστή περιγραφή της δυναμικής συμπεριφοράς του CO_2 σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Η διαδικασία που προσομοιώνεται αναφέρεται στη διαλυτότητα του CO_2 κατά την μετάβαση του από τα νεφοσταγονίδια στο σύννεφο, σε βροχή και το έδαφος που εκφράζεται ως δημιουργία πυρήνων CO_2 (φυσαλίδες) και κατ' επέκταση ως αλλαγές στο pH της βροχής καθώς μεταβάλλεται η θερμοκρασία.

ABSTRACT

The pH of rain is directly related to the CO₂ solubility and temperature changes. We report a method to identify CO₂ nucleation and relate it to its radial distribution function in wet aerosols by Molecular Dynamics Simulations. The properties of carbon dioxide (CO₂) models in wet aerosols were probed in a wide range of temperatures and at a constant pressure. The purpose of this study was to employ and evaluate the methodology of Molecular Dynamics on the accurate description of the dynamical behavior of CO₂ as it transitions between cloud droplets, rain water and the ground.