

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα διπλωματική εργασία έχει ως στόχο τον προσδιορισμό των αλληλεπιδράσεων μεταξύ τασιενεργών οργανικών ειδών και συστατικών στους πυρήνες συμπύκνωσης νεφών, με σκοπό τη διασαφήνιση των επιδράσεων των τασιενεργών αυτών ουσιών στη δημιουργία πυρήνων συμπύκνωσης νεφών.

Αυτό είχε επιτευχθεί με το σχεδιασμό ενός μοντέλου σε ηλεκτρονικό περιβάλλον με τη χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή και με βάση στις αρχές της Μοριακής και Μηχανικής Δυναμικής.

Το θεωρητικό υπόβαθρο για την κατανόηση των μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν στην έρευνα αναφέρεται στο πρώτο κομμάτι της εργασίας. Ορίζεται επίσης η επίδραση της τασιενεργής ουσίας μεθυλογλυοξάλης στα αερολύματα της ατμόσφαιρας για τη δημιουργία πυρήνων συμπύκνωσης νεφών.

Γίνεται αναφορά επίσης και στη μεθοδολογία που χρησιμοποιήθηκε για την επίτευξη αυτών των υπολογισμών όπως επίσης και στην ανάλυση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν.

**Λέξεις κλειδιά:** Πυρήνες Συμπύκνωσης Νεφών (CCN), Τασιενεργή ουσία, Μεθυλογλυοξάλη, Μοριακή Δυναμική, Αερολύματα

## **ABSTRACT**

The present dissertation aims at defining the interactions between organic surfactant species and ingredients in cloud condensation nuclei. The goal is to give insight into the effects of surfactant species on the formation of cloud condensation nuclei (CCN), using a computer model. This was achieved by using the principles of Molecular Mechanics and Dynamics. The theory behind the methods employed in this study is presented in the first part of the manuscript. Furthermore, the effect of the surfactant organic compound 'methylglyoxal' in the atmospheric aerosols for the formation of cloud condensation nuclei is depicted.

**Keywords:** Cloud Condensation Nuclei (CCN), Surface Activity, Methylglyoxal, Molecular Dynamics, aerosol