

ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ
ΣΧΟΛΗ ΓΕΩΤΕΧΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ



Πτυχιακή διατριβή

Η επίδραση της τασιενεργής ουσίας Ακεταλδεΐδης στη δημιουργία
πυρήνων συμπύκνωσης νεφών (CCN) στην ατμόσφαιρα

ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ ΔΗΜΗΤΡΙΟΥ

Λεμεσός 2015

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

Πτυχιακή διατριβή

Η επίδραση της τασιενεργής ουσίας Ακεταλδεΐδης στη δημιουργία
πυρήνων συμπύκνωσης νεφών (CCN) στην ατμόσφαιρα

ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ ΔΗΜΗΤΡΙΟΥ

Επιβλέπων καθηγητής

Δρ. ΕΥΑΓΓΕΛΟΣ ΔΑΣΚΑΛΑΚΗΣ

Λεμεσός 2015

Πνευματικά δικαιώματα

Copyright © Κωνσταντίνος Δημητρίου, 2015

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

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

Ευχαριστίες

Με την ολοκλήρωση της πτυχιακής μου εργασίας, η οποία πραγματοποιήθηκε στο εργαστήριο Υπολογιστικής Χημείας του τμήματος Επιστήμη Περιβάλλοντος και Τεχνολογίας, του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου, θα ήθελα να ευχαριστήσω πρώτα από όλους τον καθηγητή μου Δρ. Ευάγγελο Δασκαλάκη για την καθοδήγηση και υποστήριξη του καθ' όλη την διάρκεια διεκπεραίωσης της παρούσας διπλωματικής και για την διαρκή και σχολαστική παρακολούθηση της προόδου του ερευνητικού θέματος.

Χρωστάω επίσης ένα μεγάλο ευχαριστώ στη μεταπτυχιακό Φεβρωνία Χαραλάμπους για την άριστη συνεργασία που είχαμε στα πλαίσια εκπόνησης αυτής της εργασίας, για την συνεχή συμπαράσταση, τον πολύτιμο χρόνο που διάθεσε, για την προθυμία και βοήθεια που ποτέ δεν δίστασε να μου δώσει.

Ευχαριστώ επίσης την συμφοιτήτρια μου Γεωργία Γεωργίου για την άριστη συνεργασία που είχαμε κατά την εκπόνηση των εργασιών μας, καθώς και τις λύσεις και ιδέες που παρείχε όπου χρειάστηκε.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου, τα αδέρφια μου και κοντινούς μου φίλους για τη στήριξη, τη συμπαράσταση και την κατανόηση που έδειξαν όλο αυτόν τον καιρό.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα διπλωματική είχε ως γενικό στόχο τη θεωρητική μελέτη που αφορά τον σχεδιασμό ενός μοντέλου σε γραφικό περιβάλλον σε ηλεκτρονικό υπολογιστή με τη χρήση εξειδικευμένου λογισμικού στο οποίο εφαρμόζονται οι βασικές αρχές Μοριακής και Μηχανικής Δυναμικής. Γενικό αντικείμενο της μελέτης είναι η υπολογιστική θεώρηση των αλληλεπιδράσεων της τασιενεργής ουσίας ακεταλδεΐδης και της μορφολογίας ατμοσφαιρικών αερολυμάτων προς τη δημιουργία πυρήνων συμπύκνωσης νεφών (CCN) στην ατμόσφαιρα.

Σε πρώτο στάδιο δίνεται το βασικό θεωρητικό υπόβαθρο που είναι απαραίτητο για την κατανόηση των μεθόδων που χρησιμοποιήθηκαν στην έρευνα. Ορίζεται η επιφανειοδραστική ένωση ακεταλδεΐδη και η επίδραση της με αερολύματα της ατμόσφαιρας προς τη δημιουργία πυρήνων συμπύκνωσης νεφών (CCN). Δίνεται επίσης το θεωρητικό υπόβαθρο πίσω από τις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής και των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων σε ένα σύστημα. Γίνεται επίσης αναφορά στη μεθοδολογία που ακολουθήθηκε, στους υπολογισμούς και τέλος πραγματοποιείται ανάλυση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν. Μέσω των αποτελεσμάτων αυτών μπορεί να διαφωτιστεί περαιτέρω η διαδικασία σχηματισμού και ανάπτυξης πυρήνων συμπύκνωσης στην ατμόσφαιρα.

Λέξεις κλειδιά: Πυρήνες Συμπύκνωσης Νεφών (CCN), Τασιενεργή ουσία, Ακεταλδεΐδη, Μοριακή Δυναμική, Αερολύματα.

ABSTRACT

This thesis refers to the theoretical study and design of a model in a 3D graphical environment using specialized software. The basic principles of Molecular Mechanics and Dynamics are applied. The study at hand is focused on the study of the interactions between the surfactant acetaldehyde and salt morphology within atmospheric aerosols towards the formation of cloud condensation nuclei (CCN).

At first the basic theoretical background necessary for understanding the methods employed in the thesis is given. The surfactant compound acetaldehyde is presented, as well as its effect in the formation of cloud condensation nuclei upon the interaction within aerosols in the atmosphere. The theoretical background of Molecular Dynamics simulations is also given, including the interactions between atoms in a system. Reference is also made to the methodology used, the calculations and finally an analysis of the results is presented. Through this analysis we can elucidate the dynamics of the first steps in CCN formation and growth in the presence of organic matter.

Keywords: Cloud Condensation Nuclei (CCN), Surface Activity, acetaldehyde, Molecular Dynamics, Aerosol.