ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΥΑΛΩΔΟΥΣ ΜΕΤΑΠΤΩΣΗΣ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΣΥΣΤΑΤΙΚΩΝ ΑΤΜΟΣΦΑΙΡΙΚΩΝ ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΜΕΣΩ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

**Π. Σιαχούλη1,2, Κ. Σ. Καραδήμα1,2, Β. Γ. Μαυραντζάς1,2,3, Σ. Ν. Πανδής1,2\***

1Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα, Ελλάδα

2Ινστιτούτο Επιστημών Χημικής Μηχανικής, ΙΤE/ΙΕΧΜΗ, Πλατάνι Πατρών, Ελλάδα

 3 Department of Mechanical and Process Engineering, ETH Zürich, Zurich, 8092, Switzerland

\* spyros@chemeng.upatras.gr

**ΠΕΡΙΛΗΨΗ**

Τα ατμοσφαιρικά σωματίδια αποτελούν ένα σημαντικό συστατικό της ατμόσφαιρας και επηρεάζουν τόσο το περιβάλλον όσο και την ανθρώπινη υγεία. Ένα σημαντικό ποσοστό της μάζας αυτών των σωματιδίων αποτελείται από πληθώρα πολύπλοκων οργανικών ενώσεων, οι περισσότερες από τις οποίες δεν έχουν ταυτοποιηθεί ακόμα. Οι οργανικές ενώσεις που απαντώνται στην ατμόσφαιρα περιέχουν μία ή περισσότερες χαρακτηριστικές ομάδες και οι φυσικοχημικές τους ιδιότητες καλύπτουν μια ευρεία περιοχή. Η θερμοκρασία υαλώδους μετάπτωσης (glass transition temperature, *T*g) είναι μία από αυτές τις ιδιότητες και επιτρέπει την καλύτερη εκτίμηση της κατάστασης φάσης των σωματιδίων στην ατμόσφαιρα, η οποία ακολούθως επηρεάζει την ικανότητα των αεροζόλ να προσλαμβάνουν νερό, τον ρυθμό οξείδωσής τους, τη συμμετοχή τους σε ετερογενείς αντιδράσεις, κλπ. Ωστόσο, ο πειραματικός προσδιορισμός του *T*g ατμοσφαιρικών οργανικών ενώσεων δεν είναι κατά κανόνα μια εύκολη διαδικασία λόγω της δυσκολίας σύνθεσής τους.

Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής (ΜΔ) αποτελούν μια υπολογιστική μέθοδο πρόβλεψης επιθυμητών χαρακτηριστικών ιδιοτήτων, με χαμηλότερο κόστος σε σχέση με τυπικά πειράματα. Στην παρούσα εργασία, με τη βοήθεια της ΜΔ, μελετάμε το *T*g οργανικών ενώσεων ατμoσφαιρικού ενδιαφέροντος. Οι πειραματικές μελέτες του *T*g οργανικών ενώσεων που απαντώνται ως τώρα στη βιβλιογραφία παρουσιάζουν σημαντικές αποκλίσεις και στόχος της παρούσας εργασίας είναι η βαθύτερη κατανόηση του *T*g αυτών των οργανικών ενώσεων μελετώντας τις εμπλεκόμενες αλληλεπιδράσεις και τη δυναμική αυτών με τη βοήθεια των προσομοιώσεων ΜΔ. Το *T*g υπολογίζεται εφαρμόζοντας διαφορετικούς ρυθμούς ψύξης σε ένα εύλογο θερμοκρασιακό εύρος για πολλές ανεξάρτητες απεικονίσεις. Ταυτόχρονα με το *T*g εκτιμούνται η πυκνότητα των σωματιδίων και οι μη-δεσμικές ενέργειες. Οι υπό μελέτη οργανικές ενώσεις έχουν διαφορετικό μήκος αλυσίδας και φέρουν διαφορετικές χαρακτηριστικές οργανικές ομάδες τόσο σε είδος (αλκοολομάδα, καρβοξυλομάδα κ.λπ.) όσο και σε πλήθος. Η επιλογή των οργανικών ενώσεων που μελετώνται επιτρέπει την εξαγωγή συμπερασμάτων για την επίδραση της παρουσίας της κάθε χαρακτηριστικής ομάδας στο *T*g. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων της ΜΔ συγκρίνονται με διαθέσιμα βιβλιογραφικά δεδομένα καθώς και με θεωρητικές ή εμπειρικές εξισώσεις υπολογισμού του.

**ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ:** Θερμοκρασία υαλώδους μετάπτωσης, Οργανικές ενώσεις, Μοριακή Δυναμική, Ατμοσφαιρικά σωματίδια

**ΑΝΑΦΟΡΕΣ**

[1] Βuseck, P. R., & Adachi, K. (2008). *Elements* 4 389-394.

[2] Koop, T., Bookhold, J., Shiraiwa, M., & Pöschl, U. (2011). *Phys. Chem. Chem. Phys.* 13: 19238-19255.

[3] Rothfuss, N. E., & Petters, M. D. (2017). *Environ. Sci. Technol.* 51: 271-279.